

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

GUILHERME AUGUSTO STEFANELO FRANZ

**DESENVOLVIMENTO, APLICAÇÃO E ANÁLISE DO MODELO DE QUALIDADE
DA ÁGUA E EUTROFIZAÇÃO DO SISBAHIA®**

**CURITIBA
2010**

GUILHERME AUGUSTO STEFANELO FRANZ

**DESENVOLVIMENTO, APLICAÇÃO E ANÁLISE DO MODELO DE QUALIDADE
DA ÁGUA E EUTROFIZAÇÃO DO SISBAHIA®**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Dr Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha

**CURITIBA
2010**

Dedico este trabalho à minha mãe, Maria
Luiza Stefanelo, a quem devo todas as
minhas conquistas.

AGRADECIMENTOS

À prof. Dr. Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha, pela orientação durante a execução do trabalho.

A toda equipe do Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental (LEMMA), em especial ao prof. Dr. Maurício Felga Gobbi, que me orientou durante a minha iniciação científica e abriu o caminho para o mestrado.

A todos os professores e funcionários do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental, por sua atenção e dedicação.

Aos professores Dr. Luciano Felício Fernandes e Dr. Tobias Bleninger, por terem se disponibilizado a participar da banca examinadora e por suas contribuições ao trabalho.

Ao prof. Dr. Júlio César Rodrigues de Azevedo, por suas contribuições na qualificação.

À Ana Carolina Wosiack, pelo esclarecimento de dúvidas e empréstimo de livros.

Ao César e à Kelly, por suas colaborações.

À Clarisse Midori Machado, pelo apoio e carinho durante esta caminhada.

RESUMO

O processo de eutrofização em reservatórios, com o consequente crescimento excessivo de algas, pode causar restrições aos usos planejados da água. Algumas das algas que se desenvolvem durante os eventos de floração produzem substâncias tóxicas, sendo um sério risco à saúde pública em reservatórios de abastecimento. Os diversos processos que ocorrem em reservatórios podem ser representados por meio de modelos matemáticos, permitindo entender melhor o comportamento do sistema e quantificar os impactos de um determinado distúrbio. Neste trabalho, foram definidas representações para os processos de transformação considerados no modelo de qualidade da água e eutrofização do Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental (SisBAHIA[®]). Além disso, uma nova variável (zooplâncton herbívoro) foi definida para representar de forma mais adequada a dinâmica do fitoplâncton. O modelo matemático foi implementado computacionalmente usando o método das diferenças finitas na discretização temporal e elementos finitos na discretização espacial. Para a compreensão do comportamento geral do modelo foi realizada uma análise de sensibilidade baseada no método de Monte Carlo, sendo determinado o grau de influência dos seus parâmetros nas respostas de cada uma das suas variáveis. Considerando os resultados da análise de sensibilidade, o modelo foi calibrado com dados do reservatório do Iraí, localizado na região metropolitana de Curitiba-PR. Este reservatório apresenta florações de algas bastante significativas desde 2001, ano do seu primeiro extravasamento, ocasionando sérios problemas de qualidade da água. Os resultados da calibração demonstraram a potencialidade do modelo em representar adequadamente um conjunto de dados obtidos em um reservatório eutrofizado. Apesar de não haver dados suficientes para a validação do modelo, novos cenários foram simulados considerando diferentes condições de contorno para o nutriente limitante, verificando a sua confiabilidade.

Palavras-chave: Eutrofização. Reservatório. Modelo de Qualidade da Água.

ABSTRACT

The eutrophication process in reservoirs, and the resulting excessive algal growth, can cause restrictions on the planned uses of water. Some algae that develop during the algal bloom events produce toxic substances, being a serious public health risk in water supply reservoirs. The various processes occurring in reservoirs can be represented by mathematical models, allowing a better understand of the system behavior and the quantification of the impacts of particular disturbances. In this study, models were developed for the transformation processes considered in the water quality and eutrophication module of the Environmental Hydrodynamics Base System (SisBAHIA ®). In addition, a new variable (herbivorous zooplankton) was defined to represent more adequately the dynamics of phytoplankton. The mathematical model was implemented computationally using finite difference method in time discretization and finite element in space discretization. To understand the general behavior of the model, a sensitivity analysis was performed based on Monte Carlo method, to determine the degree of influence of its parameters on the responses of each of its variables. Considering the results of sensitivity analysis, the model was calibrated using data from the Iraí reservoir, located in the metropolitan region of Curitiba-PR. This reservoir has had very significant algal blooms since 2001, the year of its first overflow, causing serious problems of water quality. Calibration results demonstrated the potential of the model to adequately represent a set of data obtained in a eutrophic reservoir. Although there is no sufficient data to validate the model, new scenarios were simulated considering different boundary conditions for the limiting nutrient, verifying its reliability.

Key words: Eutrophication. Reservoir. Water quality model.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - VALORES DA TAXA DE CRESCIMENTO DO MODELO DE MICHAELIS-MENTEN EM FUNÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE SUBSTRATO PARA DIFERENTES VALORES DE K_s	35
FIGURA 2 - VALORES DA CONSTANTE DA TAXA DE REAÇÃO EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA DIFERENTES VALORES DE θ	36
FIGURA 3 - PROCESSOS REPRESENTADOS NA DINÂMICA DO FITOPLÂNCTON	53
FIGURA 4 - PROCESSOS REPRESENTADOS NO CICLO DO NITROGÊNIO	53
FIGURA 5 - PROCESSOS REPRESENTADOS NO CICLO DO FÓSFORO	54
FIGURA 6 - PROCESSOS REPRESENTADOS NA DINÂMICA OD-DBO	54
FIGURA 7 - ORDEM DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES	73
FIGURA 8 - FLORAÇÕES OCORRIDAS EM 2001 NO RESERVATÓRIO DO IRAÍ .	79
FIGURA 9 - LOCALIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO E DOS PONTOS DE AMOSTRAGEM DE CLOROFILA E DE ZOOPLÂNCTON.....	81
FIGURA 10 - DOMÍNIO DA MODELAGEM NO RESERVATÓRIO DO IRAÍ, PROFUNDIDADES E PONTOS AMOSTRAIS	82
FIGURA 11 - MALHA DE ELEMENTOS FINITOS COM 288 ELEMENTOS E 1333 NÓS	82
FIGURA 12 - ROSA DOS VENTOS DO PERÍODO DE ABRIL DE 2002 A JUNHO DE 2003, GERADA A PARTIR DOS DADOS DA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE PINHAIS.....	84
FIGURA 15 - VALORES DE NITROGÊNIO AMONIAAL MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ..	86
FIGURA 16 - VALORES DE NITRATO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	87
FIGURA 17 - VALORES DE NITROGÊNIO ORGÂNICO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ..	87
FIGURA 18 - VALORES DE FÓSFORO INORGÂNICO REATIVO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	88
FIGURA 19 - VALORES DE FOSFATO ORGÂNICO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ.....	88

FIGURA 20 - VALORES DE CLOROFILA MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	89
FIGURA 21 - VALORES DE OD MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	89
FIGURA 22 - VALORES DE DBO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	90
FIGURA 23 - VALORES DE RADIAÇÃO SOLAR MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA	91
FIGURA 24 - VALORES DE UMIDADE RELATIVA MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA	91
FIGURA 25 - VALORES DE TEMPERATURA DO AR MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA	92
FIGURA 26 – CAMPO DE VELOCIDADES DETERMINADO ATRAVÉS DO MODELO HIDRODINÂMICO PARA UM INSTANTE COM VENTO FORTE DE NORDESTE ...	98
FIGURA 27 – CAMPO DE VELOCIDADES DETERMINADO ATRAVÉS DO MODELO HIDRODINÂMICO PARA UM INSTANTE SEM VENTO.....	99
FIGURA 28 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	101
FIGURA 29 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	102
FIGURA 30 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	102
FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA DA ÁGUA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	103
FIGURA 32 – DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA DA ÁGUA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	104
FIGURA 33 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	108
FIGURA 34 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	109
FIGURA 35 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	109

FIGURA 36 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO 502	110
FIGURA 37 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	110
FIGURA 38 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	111
FIGURA 39 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	112
FIGURA 40 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	112
FIGURA 41 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS PONTO RE3	113
FIGURA 42 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	113
FIGURA 43 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	114
FIGURA 44 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	114
FIGURA 45 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	115
FIGURA 46 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	115
FIGURA 47 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	116
FIGURA 48 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	116
FIGURA 49 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	118
FIGURA 50 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	118
FIGURA 51 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS	

NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	119
FIGURA 52 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITRATO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	119
FIGURA 53 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITRATO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	120
FIGURA 54 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	120
FIGURA 55 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	121
FIGURA 56 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	121
FIGURA 57 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	122
FIGURA 58 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	122
FIGURA 59 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	123
FIGURA 60 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	123
FIGURA 61 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	124
FIGURA 62 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	124
FIGURA 63 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	125
FIGURA 64 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	126
FIGURA 65 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	126
FIGURA 66 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	127

FIGURA 67 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE DBO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	127
FIGURA 68 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE DBO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	128
FIGURA 69 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1	128
FIGURA 70 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2	129
FIGURA 71 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3	129
FIGURA 72 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE OD SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02	130
FIGURA 73 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE OD SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03	130
FIGURA 74 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON.....	132
FIGURA 75 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON.....	132
FIGURA 76 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS PONTO RE3 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON.....	133
FIGURA 77 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO 502 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON.....	133
FIGURA 78 – VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO RE1	134
FIGURA 79 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO RE2	134
FIGURA 80 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS	

NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO RE3	135
FIGURA 81 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO 502	135
FIGURA 82 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE ZOOPLÂNCTON SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02.....	136
FIGURA 83 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE ZOOPLÂNCTON SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03.....	136
FIGURA 84 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	138
FIGURA 85 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	139
FIGURA 86 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	139
FIGURA 87 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	140
FIGURA 88 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	141
FIGURA 89 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	141
FIGURA 90 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	142
FIGURA 91 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	143
FIGURA 92 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1	143
FIGURA 93 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2.....	145
FIGURA 94 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	145
FIGURA 95 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	146

FIGURA 96 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	146
FIGURA 97 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	147
FIGURA 98 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	148
FIGURA 99 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	148
FIGURA 100 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	149
FIGURA 101 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2	150

LISTA DE QUADROS

QUADRO 1 – DIFERENÇAS ENTRE OS NÍVEIS TRÓFICOS	24
QUADRO 2 – CLASSIFICAÇÃO DO NÍVEL TRÓFICO EM RESERVATÓRIOS.....	24
QUADRO 3 - VARIÁVEIS CONSIDERADAS NO MQA DO SISBAHIA®	48
QUADRO 4 - VALORES RECOMENDADOS PARA A AMPLITUDE DA RUGOSIDADE EQUIVALENTE DE FUNDO, PARA USO NO MÓDULO 2DH.....	50
QUADRO 5 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 35	55
QUADRO 6 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 40	58
QUADRO 7 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 43, 44 E 45.....	60
QUADRO 8 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 49 E 50.....	63
QUADRO 9 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 52 E 53.....	66
QUADRO 10 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 67	70
QUADRO 11 - DADOS DE VAZÃO (M^3/S) MEDIDOS NOS PONTOS AMOSTRAIS LOCALIZADOS NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ	83
QUADRO 12 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA MODELAGEM HIDRODINÂMICA	83
QUADRO 13 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSPORTE ADVECTIVO-DIFUSIVO	93
QUADRO 14 - CONDIÇÕES INICIAIS UTILIZADAS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA E EUTROFIZAÇÃO.....	93
QUADRO 15 - VALORES DOS PARÂMETROS ENCONTRADOS NA CALIBRAÇÃO DO MQA.....	106
QUADRO 16 - VALORES DOS PARÂMETROS UTILIZADOS NO MQA.....	159

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - VALORES DE CORRELAÇÃO LINEAR ENTRE AS VARIÁVEIS E OS PARÂMETROS DO MQA (VALORES EM VERMELHO POSSUEM SIGNIFICÂNCIA PARA $P < 0,05$)	97
TABELA 2 - PARÂMETROS ORDENADOS SEGUNDO O GRAU DE CORRELAÇÃO COM AS VARIÁVEIS (PARÂMETROS EM VERMELHO POSSUEM CORRELAÇÃO NEGATIVA COM A VARIÁVEL)	97
TABELA 3 - ERROS RELATIVOS MÉDIOS NA CALIBRAÇÃO SEM ZOOPLÂNCTON	107
TABELA 4 - ERROS RELATIVOS MÉDIOS NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON	131
TABELA 5 – NÍVEIS TRÓFICOS OBSERVADOS NO PONTO RE2 DURANTE O PERÍODO DE SIMULAÇÃO CONSIDERANDO O CENÁRIO 1.....	138
TABELA 6 - NÍVEIS TRÓFICOS OBSERVADOS NO PONTO RE2 DURANTE O PERÍODO DE SIMULAÇÃO CONSIDERANDO O CENÁRIO 2.....	144

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
2 CARACTERÍSTICAS DE RESERVATÓRIOS.....	16
3 PRINCÍPIOS DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA	25
3.1 MECANISMOS DE TRANSPORTE.....	29
3.2 PROCESSOS DE TRANSFORMAÇÃO	31
3.2.1 Dinâmica do Fitoplâncton e dos Nutrientes.....	36
4 METODOLOGIA	47
4.1 CONCEPÇÃO DOS PROCESSOS DE TRANSFORMAÇÃO	52
4.2 MODELO MATEMÁTICO	55
4.2.1 Fitoplâncton.....	55
4.2.2 Zooplâncton.....	58
4.2.3 Nitrogênio	59
4.2.4 Fósforo	63
4.2.5 OD-DBO.....	65
4.2.6 Temperatura da Água.....	70
4.3 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA.....	72
4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	75
4.5 APLICAÇÃO DO MQA.....	77
5 RESULTADOS	96
5.1 CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS E OS PARÂMETROS DO MQA	96
5.2 CIRCULAÇÃO HIDRODINÂMICA.....	98
5.3 SIMULAÇÃO DA TEMPERATURA DA ÁGUA	100
5.4 CALIBRAÇÃO DO MQA.....	104
5.4.1 Calibração sem Zooplâncton Herbívoro.....	106
5.4.2 Calibração com Zooplâncton Herbívoro	131
5.5 COMPARAÇÃO ENTRE AS SIMULAÇÕES.....	137
5.5.1 Aumento da Concentração de Fósforo nos Tributários.....	137
5.5.2 Diminuição na Concentração de Fósforo nos Tributários.....	144
6 CONCLUSÕES	151
APÊNDICE.....	158

1 INTRODUÇÃO

Diversos setores das atividades humanas utilizam os recursos hídricos como insumo básico para o desenvolvimento de suas atividades, destacando-se a irrigação, o uso industrial, a geração de energia elétrica e o abastecimento público. Com o crescimento populacional e a expansão das atividades humanas, os recursos hídricos vêm sendo cada vez mais pressionados. A formação de reservatórios, através do barramento de rios, permite conservar e regularizar a disponibilidade de água. Entretanto, esses reservatórios normalmente se encontram em áreas que vêm sendo crescentemente pressionadas pela expansão urbana irregular, com falta de infra-estrutura básica e de planejamento do uso do solo. Assim, pode-se afirmar que a disponibilidade de água, tanto em quantidade como em qualidade, representa um dos principais fatores limitantes ao desenvolvimento da sociedade moderna (ANDREOLI e CARNEIRO, 2005).

Os diversos fenômenos que ocorrem em um reservatório dificultam a análise quantitativa dos problemas de qualidade da água a eles associados. Modelos matemáticos podem ser utilizados para entender melhor o comportamento do sistema e antecipar eventos. Desta forma, os impactos de um determinado distúrbio no sistema podem ser quantificados antes que ele ocorra, sendo possível a realização de medidas preventivas (FRAGOSO et al., 2009).

Nos modelos matemáticos conceituais, os processos ou interações entre as variáveis de interesse são matematicamente representados por meio de equações diferenciais, que podem ser resolvidas através de métodos analíticos ou numéricos. Como os sistemas ambientais são, com frequência, altamente não-lineares e possuem geometrias complexas, uma solução analítica nem sempre é possível. Assim, os modelos matemáticos devem ser resolvidos através de técnicas numéricas.

A representação matemática de um sistema lacustre, para o estudo da qualidade da água, com seus processos físicos, químicos e biológicos, pode ser bastante complexa. Os chamados modelos de qualidade da água podem ser capazes de avaliar os impactos gerados pelo lançamento de cargas poluidoras em um determinado corpo de água, sendo que a seleção do grau adequado de complexidade depende da utilização que se deseja dar ao modelo e das

características específicas do sistema a ser modelado.

Os dados necessários aos estudos e projetos visando à gestão de recursos hídricos são geralmente escassos, devido ao alto custo envolvido no seu levantamento, sendo obtidos em poucos pontos distribuídos na área de interesse. Os modelos de qualidade da água são ferramentas indispensáveis para integrar estas informações espacialmente dispersas. Através de modelos é possível interpolar e extrapolar, espacial e temporalmente, as informações obtidas nestes pontos para toda a área de interesse. A extrapolação temporal pode ser interpretada como a simulação de novos cenários, utilizada para a análise de modificações no meio, como o aumento da carga de poluentes. Além disso, a dinâmica espacial do transporte de poluentes pode ser melhor entendida através do uso destes modelos (ROSMAN, 2001).

Segundo Tundisi (1999), o gerenciamento de reservatórios deve se basear na aplicação da teoria de ecossistemas, considerando a interação e a covariância entre componentes abióticos e bióticos. Os modelos matemáticos também permitem enunciar formalmente, através de algumas simplificações, como os componentes de um ecossistema interagem. Esses modelos ficaram conhecidos como modelos ecológicos, constituindo uma representação abstrata e imperfeita do mundo real. Modelos ecológicos podem ser classificados em função de três objetivos: realismo, precisão e generalidade. Nos problemas de ecologia aplicada, onde a previsão é o objetivo, o realismo e a generalidade são sacrificados muitas vezes em benefício da precisão (ODUM, 1983). Atualmente, a tendência é de desenvolvimento e aplicação de modelos ecológicos e de qualidade da água, que representam uma descrição mais adequada da realidade. Assim, fenômenos como o crescimento excessivo de algas em reservatórios e a bioacumulação de metais pesados podem ser estudados através do uso destes modelos (CHAPRA, 1997).

Este trabalho teve como objetivo o desenvolvimento do modelo de qualidade da água e eutrofização do Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental (SisBAHIA®), através de modificações nos processos de transformação das suas variáveis e da implementação da variável zooplâncton herbívoro, visando à sua aplicação em reservatórios. Para isso foi realizada uma revisão bibliográfica das principais características de reservatórios e sobre os princípios da modelagem da qualidade da água, mostrada nos capítulos dois e três, respectivamente. Considerações sobre o

SisBAHIA[®] e sobre os processos de transformação utilizados são mostradas no capítulo quatro, sendo definido o modelo matemático e a sua implementação numérica. Neste capítulo também são apresentadas a análise de sensibilidade, realizada para verificar as respostas do modelo quanto a variações nos seus parâmetros, e as aplicações realizadas com o modelo, incluindo a sua calibração e a simulação de novos cenários. O capítulo cinco apresenta os resultados encontrados e análises sobre o comportamento do modelo. No capítulo seis são feitas as conclusões sobre os resultados obtidos neste trabalho, sendo descritas algumas possibilidades para o desenvolvimento de novos estudos.

2 CARACTERÍSTICAS DE RESERVATÓRIOS

Apesar das similaridades, lagos e reservatórios possuem algumas diferenças importantes. Reservatórios são criados predominantemente em regiões onde grandes lagos naturais são escassos ou inadequados para exploração humana. Nestas regiões o clima tende a ser mais quente, resultando em temperaturas médias da água mais altas e em entradas de água por precipitação que são balanceadas ou menores que as perdas por evaporação. As bacias de drenagem de reservatórios normalmente são maiores, em relação à sua área de superfície, do que as bacias de lagos naturais, sendo também mais estreitas e alongadas. A maior proporção da bacia hidrográfica, na qual estão inseridos os reservatórios, geralmente está localizada acima do barramento do rio. Assim, os reservatórios recebem apenas uma pequena proporção da sua vazão afluente diretamente por escoamento superficial na bacia de drenagem, sendo que a maior parte da água, nutrientes e carga de sedimentos aporta por um ou dois tributários principais.

Os reservatórios possuem características intermediárias entre lagos e rios. Devido aos gradientes longitudinais encontrados em reservatórios, três zonas com diferentes características físicas, químicas e biológicas são distinguíveis, sendo chamadas de zonas lótica, transicional e lêntica. A zona lótica é relativamente estreita e bem misturada, com velocidades capazes de transportar significativas quantidades de finas partículas suspensas e de partículas orgânicas. Apesar da degradação de cargas orgânicas alóctones, um ambiente aeróbico é mantido porque esta zona é geralmente pouco profunda e bem misturada. Nesta zona a produção primária é geralmente limitada pela pequena penetração de luz. Ao longo da zona de transição ocorre um aumento da sedimentação das partículas devido à diminuição das velocidades, com um subsequente aumento da penetração de luz e da produtividade primária. A zona lêntica possui as características de um lago, com suficiente penetração de luz para que a produção primária seja potencialmente limitada por nutrientes (THORNTON et al., 1990).

A qualidade da água em reservatórios está intimamente ligada ao seu tempo de residência médio, definido como o volume do reservatório dividido pela taxa de afluência média. Em reservatórios largos e profundos, o tempo de residência é, em

muitos casos, da ordem de vários anos, enquanto que em reservatórios construídos a fio de água, na maioria das vezes para geração de energia elétrica, o tempo de residência pode ser de apenas uma semana. Se o tempo de residência for pequeno, a qualidade da água no reservatório pode ser determinada principalmente pela qualidade dos tributários. Entretanto, se o tempo de residência for longo, podem-se esperar efeitos significativos de fontes vindas da superfície ou do fundo do reservatório e de atividades biológicas (FISCHER et al., 1979).

Segundo Tundisi (1999), a adaptabilidade do reservatório para respostas a rápidas alterações de fluxo de água, tempo de residência e efeitos climatológicos depende da diversidade biológica e do grau de interação entre os componentes bióticos e abióticos. As mudanças rápidas, naturais ou induzidas pelo ser humano, que afetam as variáveis físicas, químicas ou biológicas dos reservatórios, são chamadas de pulsos. Pulsos naturais em reservatórios incluem ventos, precipitação e entrada de tributários. Pulsos artificiais incluem abertura de comportas, flutuações no nível da água e grande movimentação de embarcações em pequenos reservatórios. Prognósticos relacionados à operação dos reservatórios e dos usos múltiplos devem levar em conta pulsos naturais e artificiais. Pulsos podem alterar a estrutura e funcionamento dos ecossistemas, introduzindo novas concepções sobre a complexidade e a dinâmica do sistema e seus mecanismos de funcionamento.

As fronteiras em reservatórios também estão associadas à dinâmica do ecossistema. Exemplos importantes de fronteiras são: a margem dos reservatórios, onde podem ocorrer gradientes físicos e químicos acentuados; fronteira entre sedimento e água, produzindo interfaces onde há maior atividade biológica; descontinuidades estruturais em massas de água produzindo estratificação química, afetando a distribuição dos organismos; e interface ar-água.

Diferenças de temperatura geram camadas de água com diferentes densidades, podendo formar uma barreira física e impedir que as camadas se misturem. Neste caso, é dito que o ecossistema aquático está estratificado termicamente. Os principais fatores que influenciam na formação, força e extensão da estratificação térmica são a densidade da água, a radiação solar, a transferência de energia na interface ar-água, a morfometria do reservatório e a mistura causada pela entrada de tributários e saídas de água, e pelo vento (FORD, 1990).

Durante o período de estratificação, os lagos, ou as zonas lênticas de reservatórios, apresentam três camadas com diferentes gradientes de temperatura:

uma camada superior chamada epilímnio, caracterizada por uma temperatura uniforme e mais quente; uma camada inferior chamada hipolímnio, mais fria e mais densa; e uma camada intermediária chamada de metalímnio, com uma marcada descontinuidade de temperatura. Esta descontinuidade de temperatura é chamada de termoclina. As camadas formadas normalmente se encontram diferenciadas física, química e biologicamente (WETZEL, 1981; ESTEVES, 1998).

Acima dos 4 °C, a densidade da água líquida se torna cada vez menor com o aumento da temperatura, mas não de maneira uniforme. Desta forma, a diferença entre os valores de densidade da água nas temperaturas de 4 e 5 °C é significativamente inferior à observada entre 24 e 25 °C, por exemplo. Assim, em reservatórios com temperaturas mais elevadas não há a necessidade de grandes diferenças de temperatura entre camadas sucessivas para que ocorra a estratificação térmica da coluna de água. Esse fenômeno é observado, frequentemente, em regiões tropicais e subtropicais, onde se evidenciam estratificações estáveis da coluna de água com reduzidas diferenças de temperatura.

Nas regiões tropicais, a variação sazonal de temperatura é pouco acentuada em relação à variação diária. Assim, normalmente se observam estratificações e desestratificações diárias da coluna de água, ocorrendo o máximo de estabilidade térmica por volta das 16 ou 17 horas e desestratificação noturna, devido à perda de calor para a atmosfera. Este processo de desestratificação diária é facilitado pela pequena diferença de temperatura entre o epilímnio e o hipolímnio. Entretanto, no período de verão, no qual ocorre uma menor variação diária na temperatura do ar e, conseqüentemente, uma perda reduzida de calor para a atmosfera mesmo durante a noite, pode-se observar estratificações mais duradouras, que em muitos casos abrangem toda a estação (ESTEVES, 1998).

Os lagos podem ser classificados com base na circulação na coluna de água. Em princípio, os lagos podem ser holomíticos, nos quais ocorre circulação total na coluna de água, ou meromíticos, nos quais não há circulação completa e ocorre uma camada superior misturada e uma inferior mais estável. Esta classificação pode ser aplicável à zona lântica dos reservatórios. Maiores informações quanto aos tipos de lagos segundo as suas características de circulação podem ser obtidas em Fernandes et al. (2005) e Hutchinson (1957).

Segundo Esteves (1998), os compartimentos de um lago podem ser

representados pelas regiões litorânea, limnética ou pelágica, região profunda e interface água-ar. A região litorânea pode ser considerada como uma região de transição (ecótono) entre o ecossistema terrestre e o lacustre. Por esta razão, trata-se de um compartimento com um grande número de nichos ecológicos e cadeias alimentares, tanto de herbivoria como de detrito. Na maioria dos reservatórios este compartimento é pouco desenvolvido ou mesmo inexistente.

As comunidades características da região limnética são o plâncton e o nécton. A comunidade planctônica é constituída por bactérias, algas uni e pluricelulares (fitoplâncton) e invertebrados (zooplâncton), que se caracterizam pela capacidade de flutuar na água. A comunidade fitoplanctônica é composta por organismos procariontes e eucariontes fotoautotróficos, portadores de clorofila. Apesar de microscópicos, estes organismos possuem densidade um pouco superior à da água. Por este motivo, surgiram adaptações que impedem ou reduzem o seu afundamento. Alguns invertebrados possuem a capacidade de nadar ativamente, fato que os auxilia significativamente em migrações verticais. O nécton é caracterizado por possuir movimentos próprios, sendo encontrado frequentemente na região profunda. Em lagos, esta comunidade é formada quase que exclusivamente por peixes.

A região profunda é caracterizada pela ausência de organismos fotoautotróficos, causada pela não penetração de luz e por ser uma região totalmente dependente da produção de matéria orgânica na região litorânea e limnética. A comunidade presente nesta região é a bentônica, formada principalmente por invertebrados. A interface água-ar é habitada por duas comunidades: a do nêuston e a do plêuston. A existência destas comunidades se deve à tensão superficial da água. A comunidade do nêuston é formada por organismos microscópicos como bactérias, fungos e algas e a de plêuston por plantas superiores e animais.

O metabolismo de um ecossistema aquático compreende três etapas principais: produção, consumo e decomposição. A produção é realizada por todos os organismos capazes de sintetizar matéria orgânica, a partir de gás carbônico, sais minerais e energia solar. Estes organismos são chamados de produtores primários e se localizam principalmente na zona eufótica, ou seja, na zona iluminada do lago. No ambiente límico, os principais produtores primários são algas, macrófitas aquáticas e algumas espécies de bactérias.

Os consumidores são organismos que obtêm sua energia direta (herbívoros) ou indiretamente (carnívoros), a partir da matéria orgânica sintetizada pelos produtores primários. Fazem parte dos organismos herbívoros várias espécies de zooplâncton, peixes e insetos aquáticos. Os carnívoros são compostos por várias espécies de microcrustáceos planctônicos e de peixes. A transferência de energia dos produtores primários através dos herbívoros para os carnívoros é chamada de cadeia alimentar, podendo ter vários níveis. Há também os organismos detritívoros, que se alimentam de restos de plantas e animais e se localizam principalmente no sedimento, formando a comunidade bentônica. No ambiente aquático a decomposição é realizada principalmente por fungos e bactérias, que decompõem a matéria orgânica até sais minerais, água e gás carbônico. Através da decomposição é realizada a circulação dos sais minerais, possibilitando que estes sejam reaproveitados pelos organismos produtores

Em corpos de água continentais podem ser encontrados representantes de praticamente todos os grupos de fitoplâncton, sendo os principais: Cyanophyta, Chlorophyta, Euglenophyta, Chrysophyta e Pyrrophyta. Todos estes grupos possuem clorofila *a* em suas células. Por isso, a análise da clorofila *a* é um importante indicador da biomassa da comunidade fitoplanctônica. As Cyanophyta, também conhecidas como cianobactérias ou algas azuis, diferenciam-se dos demais grupos por não terem núcleo individualizado (procariontes como as bactérias) e possuírem coloração azul-esverdeada. As cianobactérias produzem substâncias chamadas de cianotoxinas, que podem causar intoxicações e até levar à morte animais, inclusive os seres humanos, sendo um sério problema de saúde pública em reservatórios de abastecimento (ANDREOLI e CARNEIRO, 2005).

Algumas cianobactérias são de fundamental importância na fixação biológica de nitrogênio em lagos. Estas algas podem ser tanto autotróficas (assimilam CO₂ com ajuda da energia solar) como mixotróficas (assimilação de compostos orgânicos), possibilitando que possam viver nas partes profundas de lagos na ausência de luz. Em lagos profundos, frequentemente, observa-se adaptação cromática, ou seja, adaptação dos pigmentos às mudanças qualitativas e quantitativas de radiação. Esta adaptação permite que a alga obtenha o máximo de produtividade em determinada condição de radiação. As cianobactérias também possuem vacúolos gasosos como uma das principais adaptações à flutuação.

A distribuição espacial do fitoplâncton não é homogênea, apresentando

diferentes distribuições tanto ao longo da coluna de água (distribuição vertical) quanto ao longo da superfície (distribuição horizontal). Os principais fatores que podem influenciar a distribuição vertical destes organismos são: densidade específica dos organismos, composição química do meio, herbivoria, “seiches” internos, turbulência da água, taxa de renovação da água, radiação solar e temperatura da água. No caso da distribuição horizontal, os fatores de influência podem ser divididos em fatores que modificam localmente a taxa de crescimento de fitoplâncton, como concentração de nutrientes, herbivoria e diferenças de temperatura, e fatores que são responsáveis pela distribuição de fitoplâncton ao longo do lago, como ventos e correntes (GEORGE e HEAVEY, 1978).

Ao observar a distribuição vertical do fitoplâncton em função da radiação solar disponível, pode-se concluir que a maior densidade destes organismos se encontra na zona eufótica. As variações diárias de radiação solar têm importância nas migrações diárias e, conseqüentemente, na distribuição vertical do fitoplâncton. Este fenômeno, denominado de fototaxia, é muito comum entre os organismos do fitoplâncton que dispõem de movimentos próprios, como as algas do grupo Chlorophyta. Estas algas, na presença de radiação solar fraca, realizam migração para a superfície (fototaxia positiva), ou, quando a radiação solar é forte, para as partes profundas do lago (fototaxia negativa). Desta forma, a migração funciona como um mecanismo adaptativo para maximizar o aproveitamento da radiação fotossintética ativa (ESTEVES, 1998).

A atividade alimentar dos organismos zooplanctônicos exerce grande influência na proliferação do fitoplâncton, através dos efeitos simultâneos de herbivoria e reciclagem de nutrientes. Em ambientes aquáticos continentais, o zooplâncton é constituído na sua maioria por protozoários (flagelados, sarcodina e ciliados) e por vários grupos metazoários, destacando-se os rotíferos (asquelmintos), cladóceros e copépodos (crustáceos). Embora muitos pesquisadores considerem que a maioria da biomassa do zooplâncton seja constituída por rotíferos e crustáceos, alguns estudos evidenciam que a biomassa dos protozoários em lagos pode ser igual ou superior a de outros componentes do zooplâncton. A negligência em relação à importância dos protozoários se deve principalmente às dificuldades metodológicas envolvidas com a coleta e a identificação destes organismos. Pode-se diferenciar o hábito alimentar do zooplâncton de acordo com o tipo e a obtenção de alimento. Os protozoários são hábeis para ingerir bactérias e cianobactérias. Os

rotíferos se alimentam tanto de algas como de detritos e bactérias através de vibrações da coroa ciliada. Os cladóceros são excelentes filtradores e se alimentam basicamente de fitoplâncton e detritos. Os copépodos são filtradores mais seletivos podendo discriminar seu alimento e decidir qual é o mais palatável (JUNIOR et al., 2005, ESTEVES, 1988).

A temperatura em reservatórios tropicais, por estar sempre acima dos valores limitantes ao crescimento, não tem efeitos tão significativos sobre a variação temporal do fitoplâncton como em reservatórios temperados. Entretanto, em reservatórios localizados em regiões subtropicais, os efeitos das diferenças de temperatura entre o inverno e o verão sobre a ecofisiologia do fitoplâncton podem ser importantes (FERNANDES et al., 2005). A temperatura também pode controlar a distribuição dos organismos zooplancônicos na coluna de água e a sua taxa reprodutiva, influenciando no tamanho da população (JUNIOR et al., 2005).

Alguns elementos são chamados de nutrientes por serem essenciais à vida dos organismos aquáticos. Os principais nutrientes são carbono, nitrogênio, fósforo e sílica. Outros micronutrientes como ferro, manganês, enxofre, zinco, cobre, cobalto e molibdênio também são necessários para o desenvolvimento destes organismos. O crescimento de fitoplâncton é normalmente limitado por fósforo e nitrogênio, com exceção das algas diatomáceas, pertencentes ao grupo Chrysophyta, que frequentemente são limitadas por sílica, e das cianobactérias, que podem fixar o nitrogênio atmosférico e, portanto, não têm seu crescimento limitado por esse nutriente.

As plantas crescem através do consumo de nutrientes inorgânicos presentes na água em proporção à sua estequiometria. Na gestão de corpos de água é importante determinar qual o nutriente que está limitando fundamentalmente o crescimento de plantas. Isso normalmente é feito para nitrogênio e fósforo. A razão entre nitrogênio e fósforo na biomassa é aproximadamente 7,2. Assim, uma razão entre nitrogênio e fósforo menor que 7,2 sugere que o nitrogênio é o nutriente limitante. Ao contrário, se a razão for maior, implica que o fósforo é o nutriente limitante. Entretanto, esta simples análise está sujeita a variações, devido, por exemplo, à variabilidade da estequiometria das plantas (THOMANN e MUELLER, 1987; CHAPRA, 1997). Segundo Wetzel (1981), os ambientes aquáticos continentais são mais sensíveis às entradas de fósforo, enquanto que o nitrogênio frequentemente limita a produção primária em sistemas estuarinos e marinhos. De

acordo com Salas e Martino (1991), a maioria dos lagos tropicais da América Latina tem o fósforo como limitante de crescimento de algas.

O aumento excessivo das concentrações de nutrientes nos ecossistemas aquáticos, principalmente fósforo e nitrogênio, é chamado de eutrofização, tendo como consequência o aumento das suas produtividades. Nogueira (1991) cita que a palavra eutrofização deriva do grego, significando bem-nutrido. Segundo Esteves (1998), o termo eutrofização deriva do termo eutrofia, utilizado originalmente por piscicultores alemães para descrever o processo de aumento da produtividade de tanques de piscicultura. A associação entre a eutrofização e o aumento na produtividade é tão direta que às vezes é utilizada como a própria definição de eutrofização. Thomann e Muller (1987) definem eutrofização como o excessivo crescimento de plantas aquáticas, tanto aderidas como planctônicas, até níveis que sejam considerados interferentes nos usos desejáveis da água.

A eutrofização pode ser natural ou artificial. Quando natural, é um processo lento e contínuo que resulta do aporte de nutrientes trazidos pelo escoamento das chuvas que erodem e lavam a superfície terrestre. Quando artificial, é um processo induzido pelo ser humano. Neste caso, os nutrientes podem ter como origem fontes pontuais, como efluentes domésticos e industriais, ou fontes difusas, como o escoamento da água da chuva sobre áreas urbanas e agrícolas (WETZEL, 1981; ESTEVES, 1998; VON SPERLING, 1995).

Os corpos de água podem ser classificados quanto ao seu nível trófico, indo da menor para a maior produtividade, em: ultraoligotrófico, oligotrófico, mesotrófico, eutrófico, e hipereutrófico. Algumas diferenças entre estes níveis tróficos são mostradas no Quadro 1. A quantificação do nível trófico pode ser realizada em termos da concentração de fósforo total ou de clorofila *a*, e da transparência da água, obtida a partir do disco de Secchi. No Quadro 2 é mostrada uma classificação do nível trófico em reservatórios, segundo o índice trófico de Carlson modificado por Lamparelli (2004), que introduziu uma nova classe ao índice (supereutrófica) para melhor diferenciar ambientes em diferentes estágios de eutrofização.

Item	Nível Trófico				
	Ultraoligotrófico	Oligotrófico	Mesotrófico	Eutrófico	Hipereutrófico
Biomassa	Bastante baixa	Reduzida	Média	Alta	Bastante alta
Fração de algas verdes e/ou cianofíceas	Baixa	Baixa	Variável	Alta	Bastante alta
Macrófitas	Baixa ou ausente	Baixa	Variável	Alta ou baixa	Baixa
Dinâmica de produção	Bastante baixa	Baixa	Média	Alta	Alta, instável
Dinâmica de oxigênio na camada superior	Normalmente saturado	Normalmente saturado	Variável em torno da supersaturação	Frequentemente supersaturado	Bastante instável, de supersaturação à ausência
Dinâmica de oxigênio na camada inferior	Normalmente saturado	Normalmente saturado	Variável abaixo da saturação	Abaixo da saturação à completa ausência	Bastante instável, de supersaturação à ausência
Prejuízo aos usos múltiplos	Baixo	Baixo	Variável	Alto	Bastante alto

QUADRO 1 – DIFERENÇAS ENTRE OS NÍVEIS TRÓFICOS

FONTE: VOLLENWEIDER (1983) (APUD SALAS E MARTINO, 2001)

Nível Trófico	Fósforo Total (mg.L-1)	Clorofila a (ug.L-1)	Secchi - S (m)
Ultraoligotrófico	$\leq 0,008$	$\leq 1,17$	$\geq 2,4$
Oligotrófico	$0,008 < FT \leq 0,019$	$1,17 < CI \leq 3,24$	$2,4 > S \geq 1,7$
Mesotrófico	$0,019 < FT \leq 0,052$	$3,24 < CI \leq 11,03$	$1,7 > S \geq 1,1$
Eutrófico	$0,052 < FT \leq 0,120$	$11,03 < CI \leq 30,55$	$1,1 > S \geq 0,8$
Supereutrófico	$0,120 < FT \leq 0,233$	$30,55 < CI \leq 69,05$	$0,8 > S \geq 0,6$
Hipereutrófico	$> 0,233$	$> 69,05$	$< 0,6$

QUADRO 2 – CLASSIFICAÇÃO DO NÍVEL TRÓFICO EM RESERVATÓRIOS

FONTE: LAMPARELLI (2004)

A eutrofização tem como consequências alterações qualitativas e quantitativas nas comunidades aquáticas, nas condições físicas e químicas do meio e no nível de produção do sistema, podendo ser considerada uma forma de poluição. As algas, quando em condições favoráveis e principalmente em corpos de água eutrofizados, crescem em altas densidades, ocasionando o fenômeno denominado floração de algas. O processo da eutrofização pode causar restrições aos usos planejados e aumento dos custos do tratamento da água, e pode oferecer riscos à saúde humana (ANDREOLI e CARNEIRO, 2005).

3 PRINCÍPIOS DA MODELAGEM DA QUALIDADE DA ÁGUA

Os modelos de qualidade da água evoluíram consideravelmente desde suas primeiras aplicações no início do século XX, focadas principalmente nos problemas relacionados ao lançamento de efluentes urbanos em rios. Chapra (1997) cita que o trabalho primordial realizado nesta área foi o modelo desenvolvido por Steeter e Phelps, no rio Ohio, em 1925. Este e outros trabalhos subsequentes proveram um meio de avaliar o nível de oxigênio dissolvido em rios e estuários. Pela falta de computadores disponíveis na época, a aplicação de modelos era limitada a cinéticas lineares, geometrias simples e condição de estado permanente.

Com a maior disponibilidade de computadores na década de 1960, avanços significativos foram realizados tanto na estrutura dos modelos, quanto nas maneiras em que eles poderiam ser aplicados. O oxigênio dissolvido continuou sendo o foco, mas o uso de computadores permitiu abordar sistemas com geometrias complexas, cinéticas mais complicadas e simulações variáveis no tempo. Além disso, os computadores permitiram uma abordagem mais abrangente dos problemas de qualidade da água, podendo-se considerar a bacia hidrográfica como um sistema, ao invés de focar apenas nos efeitos locais de uma única fonte pontual.

Na década de 1970, as preocupações da sociedade ultrapassaram os problemas de oxigênio dissolvido e de fontes urbanas pontuais para uma preocupação mais geral com o meio ambiente. O principal problema de qualidade da água abordado nesta época foi a eutrofização. Como consequência, o âmbito dos modelos foi aumentado para incluir representações dos processos biológicos. A ênfase na eutrofização também aumentou a preocupação com as fontes não-pontuais, por serem contribuintes importantes de nutrientes.

Progressos significativos vêm ocorrendo nas últimas décadas no desenvolvimento e aplicação de modelos de qualidade de água em lagos e reservatórios. A maioria destes modelos tem sido acoplada com modelos hidrodinâmicos, e incluem detalhados processos bioquímicos e biológicos que permitem avaliações abrangentes do comportamento do sistema sob uma ampla variedade de condições. Arhonditsis e Brett (2005) e Zhao et al. (2008) apresentam modelos complexos com múltiplos ciclos de elementos (C, N, P, Si, O) e múltiplos grupos funcionais de fitoplâncton (diatomáceas, algas verdes e cianobactérias) e de

zooplâncton (copépodos e cladóceros).

O processo de modelagem tem início com a fase de especificação do problema, na qual são obtidas informações sobre os objetivos de gestão, opções de controle, e restrições. Além disso, deve ser realizado um levantamento das informações existentes sobre o corpo de água e a bacia de drenagem. Muitas vezes estas informações são esparsas, ou mesmo inexistentes, podendo ser realizada uma coleta de dados preliminar. Após esta fase, o modelador poderá ter uma idéia clara das dificuldades relacionadas com os objetivos e das variáveis necessárias para verificar se os objetivos são atingíveis. Após o conhecimento do problema, o próximo passo é a definição do modelo que será utilizado (CHAPRA, 1997).

Atualmente, existem diversos sistemas computacionais disponíveis com modelos de qualidade da água que podem ser aplicados em lagos e reservatórios. Alguns destes sistemas podem ser utilizados gratuitamente, como o WASP, o MOHID e o CE-QUAL-W2. O WASP (*Water Quality Analysis Simulation Program*) é um modelo dinâmico que possui dois compartimentos (coluna de água e sedimento). Além disso, é possível dividir os compartimentos em segmentos, como epilímnio e hipolímnio, e camada superior e inferior do sedimento. Este modelo é disponibilizado pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos. O WASP permite a análise de sistemas aquáticos em uma, duas ou três dimensões, podendo ser combinado com diversos modelos hidrodinâmicos para gerar as vazões, volumes, profundidades e velocidades (WOOL et al., 2001).

O MOHID é um modelo desenvolvido no Instituto Superior Técnico na Universidade Técnica de Lisboa. O modelo pode ser utilizado em uma, duas ou três dimensões, sendo composto por diferentes módulos (por exemplo, hidrodinâmico, lagrangeano, propriedades da água, qualidade da água). A discretização espacial do domínio é realizada através da técnica de volumes finitos. O MOHID é capaz de simular processos físicos e bioquímicos na coluna de água e no sedimento, sendo também capaz de simular as interações entre estes compartimentos. O módulo de qualidade da água do MOHID simula os ciclos biogeoquímicos do oxigênio, nitrogênio, fósforo e sílica. Além disso, também são simulados os organismos: fitoplâncton (flagelados e diatomáceas), zooplâncton (micro e mesozooplâncton) e bactérias. Mateus (2006) desenvolveu um novo módulo chamado *mohid.Life.1.0* dentro do modelo MOHID, representando o estado da arte em modelos ecológicos para sistemas marinhos.

O CE-QUAL-W2 é um modelo de qualidade da água e hidrodinâmico bidimensional na vertical, sendo integrado na direção lateral, para rios, estuários, lagos, reservatórios e sistemas de bacias hidrográficas. A última atualização deste modelo (versão 3.6) pode ser aplicada em sistemas estratificados e não-estratificados, e é capaz de simular processos relacionados à eutrofização, como as relações entre a temperatura, nutrientes, algas, oxigênio dissolvido, matéria orgânica e sedimento, representando diversos grupos de algas, epífiton/perífiton, zooplâncton e macrófitas (WATER QUALITY RESEARCH GROUP, 2009).

No desenvolvimento de um modelo, duas fases devem ser consideradas: o desenvolvimento teórico, e a especificação numérica e validação. Um dos aspectos mais importantes do desenvolvimento teórico está na escolha da complexidade do modelo. Modelos muito simplificados serão tão irrealistas que não produzirão previsões confiáveis, enquanto que modelos muito complexos serão tão detalhados que superam os dados disponíveis. Consequentemente, os modelos complexos podem ser igualmente incertos devido às incertezas associadas à definição dos parâmetros.

Após o desenvolvimento teórico, com a definição de equações para representar os fenômenos de interesse, é necessária a transformação do modelo matemático em um modelo numérico. Esta transformação é realizada através de diferentes métodos numéricos como, por exemplo, diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Assim, as equações podem ser resolvidas através do desenvolvimento de programas em linguagens computacionais. Nesta etapa, o programa precisa ser devidamente testado para garantir que não há erros na implementação numérica do modelo. Algumas das abordagens utilizadas são:

- Conservação de massa – O modelo deve ser testado para garantir que a massa é conservada, ou seja, dentro do período de simulação a mudança na acumulação deve ser igual à soma das fontes menos as perdas de massa.
- Soluções simplificadas – Comparação dos resultados do modelo com casos simplificados para os quais existam soluções analíticas.
- Condições variadas – A confiabilidade do modelo deve ser testada através da sua aplicação em diferentes sistemas sob diferentes condições iniciais, condições de contorno e cenários.

- Resultados gráficos – São de grande importância para a análise do desempenho e de falhas no modelo, como, por exemplo, instabilidades numéricas.

O próximo passo no processo é executar algumas aplicações preliminares no sistema a ser modelado. Apesar de muitas vezes não haver alguns dados necessários, estas aplicações são muito importantes para identificar deficiências nos dados e lacunas teóricas, provendo informações importantes para o planejamento de estudos em campo e em laboratório para preencher estas lacunas. Nesta fase, também pode ser útil a identificação dos parâmetros mais importantes do modelo. Uma maneira de identificar estes parâmetros e entender o comportamento geral do modelo de qualidade da água é através de uma análise de sensibilidade. Algumas das técnicas utilizadas com esta finalidade incluem Análise de Sensibilidade de Primeira Ordem, Simulação de Monte Carlo e Amostragem por Hipercubo Latino. Manache e Melching (2004) apresentam diferentes medidas para quantificar a contribuição dos parâmetros para os resultados do modelo. Estas medidas são baseadas na análise de regressão e correlação aplicadas aos parâmetros e resultados originais ou aos seus valores ranqueados (ranking 1 para o menor valor), no caso de relações não-lineares.

O próximo passo é a calibração do modelo para ajustar os seus resultados a um conjunto de dados. Este passo consiste em variar os parâmetros do modelo para obter uma correspondência ótima entre os seus resultados e os dados. Entretanto, antes do início da calibração, é necessário verificar se as cargas, as condições de contorno e as condições iniciais são suficientemente precisas para não serem fontes significativas de incertezas. Da mesma forma, uma caracterização acurada da geometria e da hidrodinâmica do sistema precisa ser realizada.

O processo de calibração pode ser realizado de forma sistemática, com a fixação dos valores de parâmetros medidos ou estimados através das variáveis de estado, e a variação dos parâmetros restantes dentro de uma faixa razoável até que o melhor ajuste seja atingido. Existem diferentes abordagens na definição destes parâmetros, como pelo processo de tentativa e erro, ou através de técnicas automáticas (por exemplo, regressão por mínimos quadrados). Após a calibração, tudo o que se pode afirmar é que o modelo se ajusta a um determinado conjunto de dados. Assim, antes que o modelo possa ser utilizado com confiança na análise de cenários, ele precisa ser confirmado com um novo conjunto de dados. Nesse caso, é

dito que o modelo foi validado. Reckhow e Chapra (1983) analisaram diferentes práticas para a confirmação de modelos através de testes estatísticos. Entretanto, normalmente não existem dados suficientes para a efetiva calibração e confirmação de modelos matemáticos. Os modelos validados são ferramentas indispensáveis à gestão e ao gerenciamento de corpos de água, pois permitem (ROSMAN, 2009):

- Otimizar a aplicação de recursos com o monitoramento de variáveis ambientais através da correta definição dos pontos de amostragem;
- Ampliar as informações obtidas com dados disponíveis em alguns pontos para toda a área de interesse;
- Propiciar o entendimento de processos dinâmicos;
- Prever situações simulando diferentes cenários;
- Auxiliar na escolha da melhor alternativa para a obtenção de licença ambiental, como nos casos de lançamento de efluentes ou construção de barragens;
- Definir estratégias de ação em caso de acidentes com derrame de contaminantes;
- Elaborar planos de mitigação.

3.1 MECANISMOS DE TRANSPORTE

A distribuição de uma substância no interior de um corpo de água é realizada através dos mecanismos de transporte advectivo e difusivo. O transporte advectivo pode ser definido como o movimento da substância de uma posição para outra no espaço, ocasionado pelo campo de velocidades da água. A determinação do campo de velocidades em corpos de água com superfície livre, como reservatórios, é realizada através do uso de modelos hidrodinâmicos, representando um conjunto de dados de entrada fundamental para os modelos de qualidade da água. Maiores informações sobre modelagem hidrodinâmica podem ser obtidas em Rosman (1997).

O transporte difusivo pode ser definido como o movimento da substância de um local mais concentrado para outro menos concentrado, sendo realizado pelos processos de difusão molecular, devido ao movimento aleatório das moléculas de

um fluido, e de difusão turbulenta, devido a turbilhões de variados tamanhos e orientações. Em grandes reservatórios ou lagos, o vento é o agente primário na transmissão de movimento aleatório para a água (CHAPRA, 1997).

Os modelos de qualidade da água são baseados no princípio de conservação de massa, representando o transporte advectivo-difusivo e mudanças nas concentrações das substâncias devido a processos químicos, físicos e biológicos. Quando a substância é passiva, ou seja, o campo de velocidades é independente da sua concentração, o estudo do transporte da substância é um problema desacoplado da modelagem hidrodinâmica.

Os modelos de qualidade da água possuem dimensionalidade variada, de acordo com o corpo de água de interesse. Modelos de qualidade da água de dimensão zero podem ser usados para estimar a média espacial da concentração de um poluente. Neste caso, assume-se que o poluente se encontra completamente misturado dentro do corpo de água e dados da circulação hidrodinâmica não são necessários. Modelos em uma dimensão são usualmente utilizados para simular rios, onde a geometria do sistema é representada por uma rede linear de segmentos e a variação dos parâmetros de qualidade da água ocorre longitudinalmente, conforme a água é transportada de um segmento para outro. Estes modelos também são usados em lagos profundos e de pequena área, para simular a variação vertical da temperatura e de outros parâmetros de qualidade.

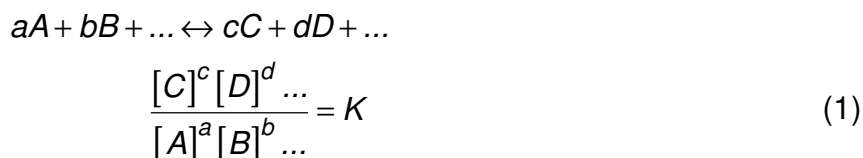
Modelos de qualidade da água de lagos e estuários são frequentemente de duas ou três dimensões, de forma a representar a heterogeneidade espacial dos corpos de água. Os modelos bidimensionais podem incluir a dimensão vertical com segmentação longitudinal, sendo utilizados para lagos ou estuários profundos e estreitos. Modelos em três dimensões têm sido utilizados para simular os padrões de circulação em lagos de forma completa. Parte da necessidade da utilização destes modelos é a preocupação com a qualidade da água nas zonas próximas à margem e nas zonas profundas do lago. As diferentes interações nestas zonas podem provocar mudanças na qualidade da água do lago que não poderiam ser previstas sem esta definição espacial (BOWIE et al., 1985).

Quando modelos em uma ou duas dimensões são utilizados, um novo termo é acrescentado à equação do transporte para representar a perda da advecção diferenciada ao longo da direção vertical e/ou da direção horizontal. Este processo é chamado de dispersão, sendo o resultado das diferenças de velocidade no espaço.

O efeito destas diferenças na velocidade média é espalhar ou misturar a substância (CHAPRA, 1997).

3.2 PROCESSOS DE TRANSFORMAÇÃO

Os processos físicos, químicos e biológicos podem provocar aumento ou redução das concentrações das substâncias dentro do sistema. As reações químicas e bioquímicas podem ser modeladas através da definição da sua cinética, que está relacionada às velocidades ou taxas em que estas reações ocorrem. As reações podem ser divididas em reversíveis e irreversíveis. Nas reações reversíveis os reagentes se combinam para formar produtos e os produtos se combinam para formar reagentes. Quando a formação de produtos é balanceada pela formação de reagentes, é dito que a reação atingiu o equilíbrio. Nas reações irreversíveis não ocorre a reação reversa de formação de reagentes. Um exemplo de reação irreversível é a decomposição da matéria orgânica. A Equação (1) mostra uma formulação geral da relação de equilíbrio (SAWYER et al., 2003):



onde a , b , c , d são o número de moléculas das respectivas substâncias ou coeficientes estequiométricos, $[]$ representa as concentrações das substâncias e K é constante a uma dada temperatura, sendo chamada de constante de equilíbrio.

A taxa na qual ocorre uma reação pode ser expressa quantitativamente através da lei de ação das massas, que define que esta taxa é proporcional às concentrações dos reagentes (CHAPRA, 1997). As taxas de transformação da Equação 1 para a direita e para a esquerda podem ser descritas por:

$$\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -k_{(\rightarrow)} [A]^a [B]^b$$

$$\frac{d[C]}{dt} = \frac{d[D]}{dt} = -k_{(\leftarrow)} [C]^c [D]^d \quad (2)$$

Quando a reação encontra-se em equilíbrio as taxas de transformação serão iguais e a constante de equilíbrio pode ser calculada por:

$$K = \frac{k_{(\rightarrow)}}{k_{(\leftarrow)}} \quad (3)$$

A ordem da reação é definida como a soma dos expoentes dos termos de concentração mostrados na Equação 2. As reações de ordem zero são independentes das concentrações, sendo sua taxa de transformação representada por:

$$\frac{dC}{dt} = -k \quad (4)$$

onde C é a concentração do reagente e k é uma constante dada em unidades de concentração por tempo ($M L^{-3} T^{-1}$). Exemplos destas reações incluem a oxidação de amônia para nitrito e a oxidação de glucose por bactérias aeróbias. Entretanto, estas reações bioquímicas se tornam mais lentas quando as concentrações de substrato se aproximam de zero.

Para reações de ordem um (ou de primeira ordem), a taxa de transformação é diretamente proporcional à concentração de reagente, sendo representada por:

$$\frac{dC}{dt} = -kC \quad (5)$$

onde k tem unidades de T^{-1} . Exemplos destas reações incluem a dissolução e a remoção de gases na água e a decomposição de matéria orgânica por bactérias em ensaios para definir a demanda bioquímica de oxigênio (DBO) em uma amostra de água.

As reações que ocorrem em apenas uma fase (gás, líquido, ou sólido) são chamadas de homogêneas, enquanto que as reações que envolvem mais de uma fase são chamadas de heterogêneas. Normalmente, as reações utilizadas na modelagem da qualidade da água são homogêneas. Entretanto, reações heterogêneas também podem ser utilizadas, como, por exemplo, para representar o processo de reaeração.

A taxa com que um gás é transferido para um líquido pode ser representada através do conhecimento do quão distante se encontra a concentração do gás no líquido da concentração de equilíbrio. Esta concentração de equilíbrio pode ser definida através da lei de Henry, definida conceitualmente como: “A massa de qualquer gás que irá dissolver em um dado volume de líquido, em uma temperatura constante, é diretamente proporcional à pressão que o gás exerce sobre o líquido”. Assim, a taxa de dissolução do gás é proporcional à diferença entre a concentração

de equilíbrio, dada pela lei de Henry, e a atual concentração no líquido, sendo representada matematicamente por (SAWYER et al., 2003):

$$\frac{dC}{dt} = k(C_{equi} - C) \quad (6)$$

As reações de ordem dois (ou de segunda ordem) são aquelas em que a taxa da reação é proporcional ao quadrado da concentração de um dos reagentes ou ao produto da concentração de dois reagentes diferentes. Assim, a taxa de transformação pode ser representada por:

$$\begin{aligned} \frac{dC_a}{dt} &= -kC_a^2 \\ \frac{dC_a}{dt} &= -kC_aC_b \end{aligned} \quad (7)$$

onde C_a e C_b são as concentrações dos reagentes A e B , respectivamente, e k tem unidades de $L^3 M^{-1} T^{-1}$. Uma utilização importante das reações de ordem dois é a representação de transformações biológicas.

Reações consecutivas são de grande importância em sistemas ambientais. Em reações consecutivas, os produtos de uma reação se tornam reagentes para uma próxima reação. Considerando a seguinte reação:



onde o reagente A é convertido em B , através da constante de transformação k_1 , que por sua vez é transformado em C , através da constante de transformação k_2 . Se as taxas de cada reação consecutiva forem consideradas de ordem um, então as equações diferenciais que descrevem as taxas de decomposição e de formação dos reagentes e produtos são:

$$\begin{aligned} \frac{dC_a}{dt} &= -k_1C_a \\ \frac{dC_b}{dt} &= k_1C_a - k_2C_b \\ \frac{dC_c}{dt} &= k_2C_b \end{aligned} \quad (9)$$

As reações consecutivas podem ser utilizadas para descrever o processo de nitrificação, no qual a amônia é oxidada para nitrito, que em uma segunda reação é oxidado para nitrato

Vários compostos podem reagir em corpos de água para formar outros compostos. Para determinar a quantidade de reagente que é consumido ou de

produto que é formado, são utilizadas razões estequiométricas dos compostos atuantes em uma determinada reação (CHAPRA, 1997).

O crescimento de microrganismos também pode ser representado através de reações. Um exemplo simples para a representação do crescimento pode ser construído considerando apenas taxas de crescimento e morte. Essas taxas podem ser consideradas constantes ou variáveis. Por exemplo, o crescimento do microrganismo pode ser considerado dependente da concentração de substrato.

A relação entre a taxa de crescimento de microrganismos, como as bactérias responsáveis pela decomposição do carbono orgânico, e a concentração do substrato pode ser descrita pelo seguinte modelo empírico:

$$k_g = k_{g,\max} \frac{S}{k_s + S} \quad (10)$$

onde $k_{g,\max}$ é a máxima taxa de crescimento quando o substrato é abundante (d^{-1}), S é a concentração de substrato ($mg\ L^{-1}$) e k_s é a constante de meia saturação ($mg\ L^{-1}$). A Equação 10 é chamada de modelo de Michaelis-Menten, sendo utilizada no estudo da cinética de enzimas, ou de modelo de Monod, referência ao microbiologista Jaques Monod, primeiro a aplicar esta equação para modelar o crescimento microbiano. A constante de meia saturação representa a concentração de substrato na qual o crescimento é igual à metade do crescimento máximo. Assim, esta constante determina em que nível o substrato se torna limitante. A Figura 1 mostra os valores da taxa de crescimento do modelo de Michaelis-Menten em função da concentração de substrato, para a máxima taxa de crescimento igual a $1\ d^{-1}$ e três diferentes constantes de meia saturação. A teoria desenvolvida para simular o crescimento microbiano é de grande importância em modelos de qualidade da água, particularmente para modelar o crescimento de algas (CHAPRA, 1997).

Em geral, as taxas da maioria das reações químicas e biológicas crescem com o aumento da temperatura. Uma regra aproximada é que a taxa da reação aproximadamente dobra com o aumento de $10\ ^\circ C$ na temperatura. Em reações biológicas, esta regra valerá em partes até que seja atingida a temperatura ótima de crescimento. Acima desta temperatura, as taxas de crescimento diminuem, provavelmente devido à destruição de enzimas em altas temperaturas (SAWYER et al., 2003).

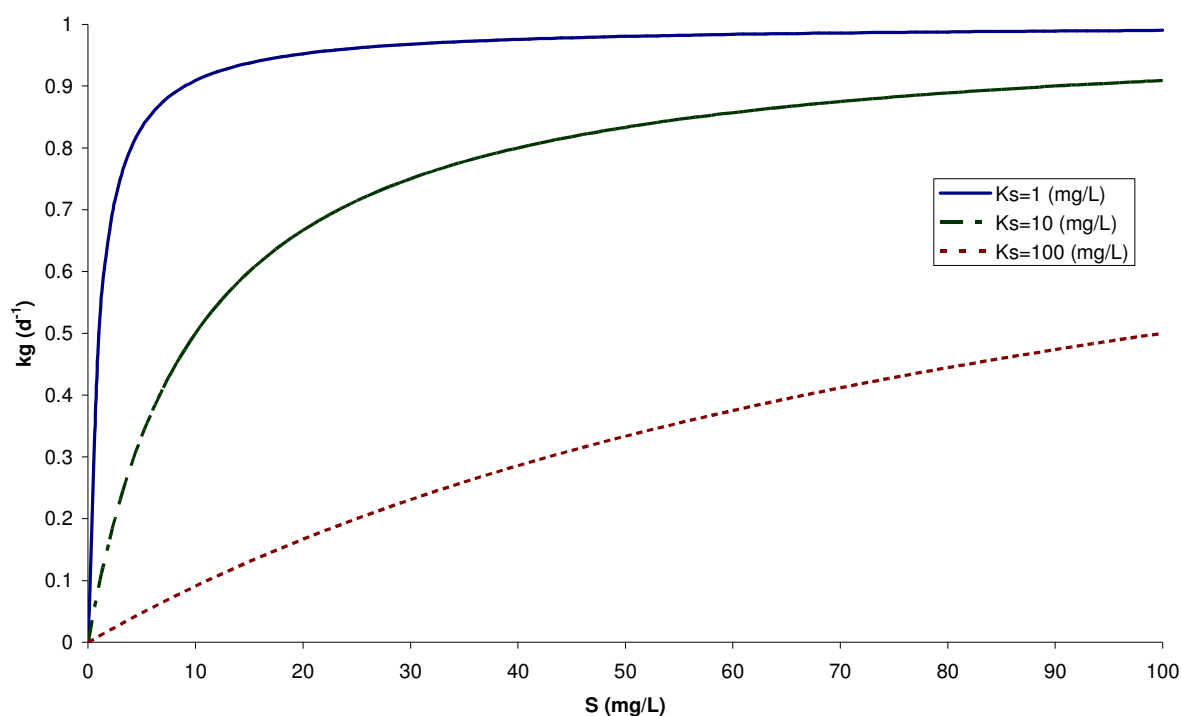


FIGURA 1 - VALORES DA TAXA DE CRESCIMENTO DO MODELO DE MICHAELIS-MENTEN EM FUNÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE SUBSTRATO PARA DIFERENTES VALORES DE K_S

A dependência da temperatura nas taxas das reações pode ser representada através da equação de Arrhenius:

$$k(T) = A e^{\frac{-E}{RT}} \quad (11)$$

onde k é a constante da taxa de reação em uma determinada temperatura T (K), A é uma constante que depende da reação, E (J mole^{-1}) é chamado de energia de ativação e R ($8.314 \text{ J mole}^{-1} \text{ K}^{-1}$) é a constante dos gases. Utilizando a Equação 11, é possível comparar a constante da taxa de reação em duas temperaturas diferentes. Isso pode ser feito a partir da razão entre as expressões das duas constantes:

$$\frac{k(T_2)}{k(T_1)} = e^{\frac{E(T_2 - T_1)}{RT_2 T_1}} \quad (12)$$

A Equação 12 pode ser simplificada considerando que as temperaturas na maioria dos corpos de água variam em uma faixa estreita (273 até 313 K). Assim, o produto de T_1 e T_2 é relativamente constante. Consequentemente, pode-se definir uma nova constante:

$$\theta = e^{\frac{E}{RT_2T_1}} \quad (13)$$

Considerando também que a diferença entre as temperaturas em escala absoluta ou centígrada são idênticas e que a maioria das reações em modelos de qualidade da água é relatada a 20 °C, a Equação 11 pode ser expressa por (CHAPRA, 1997):

$$k(T) = k(20)\theta^{T-20} \quad (14)$$

onde $k(20)$ é a constante da taxa de reação em 20° C. A Figura 2 mostra os valores da constante da taxa de reação em função da temperatura, para $k(20)$ igual a 1 d⁻¹ e quatro diferentes valores da constante θ .

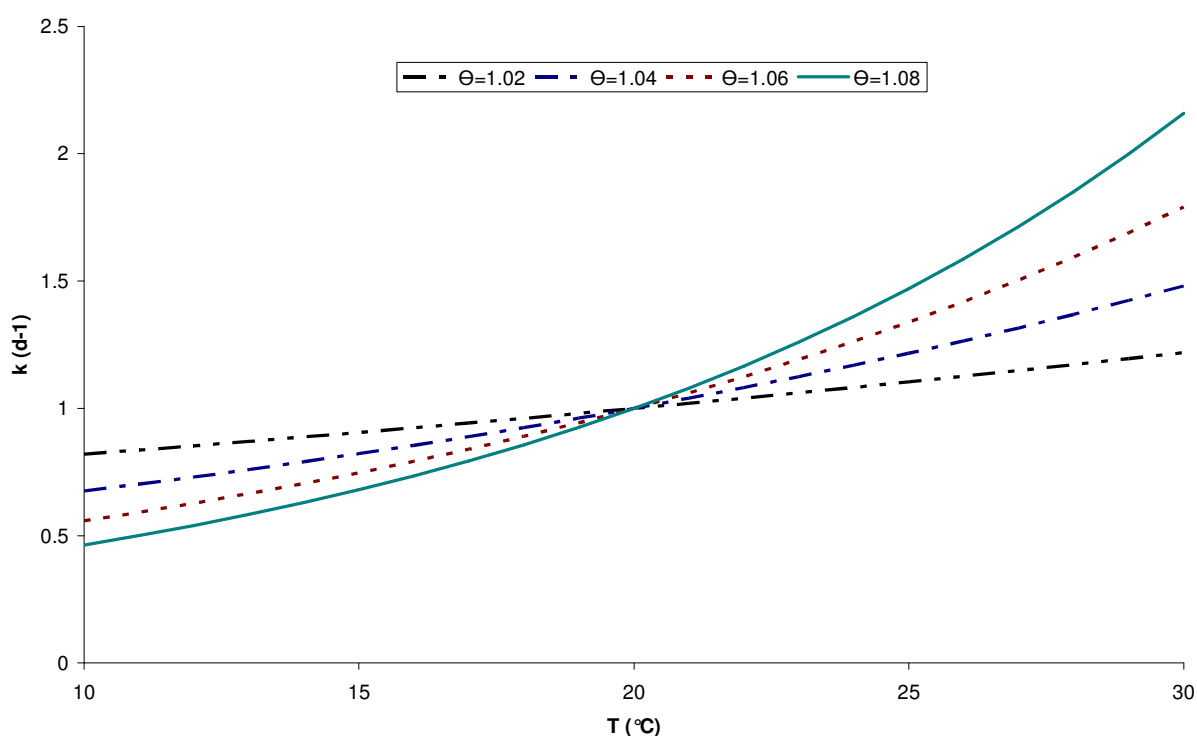


FIGURA 2 - VALORES DA CONSTANTE DA TAXA DE REAÇÃO EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA DIFERENTES VALORES DE θ

3.2.1 Dinâmica do Fitoplâncton e dos Nutrientes

O crescimento de fitoplâncton é função da intensidade de luz, da disponibilidade de nutrientes e da temperatura. Sob o patrocínio da Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos, Bowie et al. (1985) apresentaram um relatório com uma vasta revisão dos princípios das formulações utilizadas na

modelagem da qualidade da água, incluindo a modelagem de algas. A formulação da taxa de crescimento usada na maioria dos modelos e qualidade da água pode ser expressa de forma geral da seguinte maneira:

$$k_g = k_g(T_{ref})f(T)\phi(I,n) \quad (15)$$

onde $k_g(T_{ref})$ é a taxa máxima de crescimento em uma temperatura de referência sob condições ótimas de luz e com excesso de nutrientes (d^{-1}), $f(T)$ é a função de crescimento relacionada a mudanças na temperatura, e $\phi(I,n)$ representa os fatores de limitação ao crescimento devido aos nutrientes e à luz. Os fatores de atenuação possuem valores entre 0 e 1, sendo iguais a 0 para limitação completa e iguais a 1 para nenhuma limitação. Quatro abordagens diferentes têm sido utilizadas para combinar os fatores de limitação para a luz e cada nutriente: multiplicação, valor mínimo, média harmônica e média aritmética. A abordagem mais usual é a da multiplicação.

Diversas funções de ajuste para modelar o crescimento de algas em diferentes temperaturas têm sido usadas. Entretanto, a grande maioria pode ser classificada em três categorias gerais: aumento linear na taxa de crescimento com a temperatura; aumento exponencial na taxa de crescimento com a temperatura; curvas de temperatura ótima nas quais a taxa de crescimento aumenta com a temperatura até um valor ótimo e decai com temperaturas maiores. As curvas de temperatura ótima são geralmente mais apropriadas que as formulações lineares ou exponenciais quando é considerada uma espécie ou grupo específico de algas, já que o crescimento usualmente cai e eventualmente cessa acima de temperaturas limites para uma dada espécie. Esta abordagem é usada na maioria dos modelos que simulam diversos grupos de algas, já que a variação sazonal na temperatura é um dos principais fatores que causam a sucessão na dominância dos diferentes grupos. Quando apenas um grupo de algas é simulado, pode-se supor que com o aumento da temperatura há uma mudança na composição das espécies, sendo que as espécies com temperatura ótima de crescimento próxima à temperatura do ambiente tendem a dominar a comunidade fitoplanctônica. Neste caso, os modelos lineares ou exponenciais passam a ser adequados. O modelo exponencial mais utilizado é baseado na equação de Arrhenius com uma temperatura de referência de 20 C°, mostrado na Equação 14.

Os principais nutrientes limitantes ao crescimento são fósforo, nitrogênio,

carbono e sílica. Outros micronutrientes também podem limitar o crescimento em condições de disponibilidade restrita. Entretanto, este efeito geralmente não é incluído em modelos de qualidade da água, pois os micronutrientes normalmente não são simulados. O fator limitante do crescimento devido à baixa concentração de nutrientes é simplificado na maioria dos modelos. Por exemplo, a sílica é incluída apenas em modelos em que as diatomáceas são simuladas como um grupo separado de algas, e o carbono é omitido, já que frequentemente está disponível em excesso quando comparado às concentrações de fósforo e nitrogênio. Os nutrientes estão presentes nos sistemas aquáticos das seguintes formas:

- inorgânica dissolvida;
- orgânica dissolvida;
- orgânica particulada;
- sedimento;
- biótica.

Cada nutriente sofre uma reciclagem contínua entre as principais formas listadas acima. Por exemplo, os nutrientes inorgânicos dissolvidos são removidos da coluna de água pelo fitoplâncton e outras plantas aquáticas durante a fotossíntese. Estes nutrientes são distribuídos para os outros organismos aquáticos através da cadeia alimentar. Os nutrientes inorgânicos dissolvidos retornam para a água através das perdas por processos metabólicos e da morte dos organismos, da decomposição dos detritos e dos sedimentos, e da hidrólise dos nutrientes orgânicos dissolvidos.

O nitrogênio está presente em diferentes formas em corpos de água naturais, como nitrato, nitrito, amônia, íon amônio, óxido nitroso, nitrogênio molecular, nitrogênio orgânico dissolvido, e nitrogênio orgânico particulado. O nitrato e a amônia são as principais fontes para os produtores primários. A amônia existe em duas formas em águas naturais, íon amônio (NH_4^+) e gás amônia (NH_3). O nitrogênio também é importante para a qualidade da água devido ao consumo de oxigênio durante o processo de nitrificação, no qual a amônia é oxidada para nitrato. O consumo de oxigênio causado por este processo pode representar uma porção significativa da demanda biológica de oxigênio total. Além disso, o nitrato em concentrações suficientemente altas pode causar efeitos sérios e ocasionalmente

fatais em crianças ao ser ingerido, enquanto a amônia em sua forma não ionizada (NH_3) é tóxica para peixes e outros organismos aquáticos. Os processos da dinâmica do nitrogênio que são simulados em modelos de qualidade da água incluem:

- Amonificação: liberação de amônia devido a processos de decaimento.
- Nitrificação: oxidação da amônia para nitrato diretamente (processo de uma etapa) ou para nitrito e depois para nitrato (processo de duas etapas).
- Desnitrificação: redução de nitrato para nitrogênio molecular (N_2) sob condições anaeróbias.
- Consumo: acumulação de nitrogênio inorgânico por plantas durante o crescimento fotossintético. A amônia e o nitrato são acumulados, com preferência para amônia sobre formas oxidadas. Entretanto, nem todos os modelos incluem esta preferência.
- Fixação de nitrogênio: redução de N_2 para compostos amonizados. A fixação pelas cianobactérias é uma fonte importante de acumulação de nitrogênio em corpos de água. Entretanto, o consumo de formas inorgânicas prevalece sobre a fixação de nitrogênio.

Toda forma de fósforo presente em águas naturais, tanto na forma iônica quanto na forma complexada, encontra-se sob a forma de fosfato. O fosfato presente em águas continentais pode ser classificado como fosfato particulado, fosfato orgânico dissolvido, fosfato inorgânico dissolvido ou ortofosfatos ou fosfato reativo, fosfato total dissolvido e fosfato total. Os ortofosfatos são a principal forma de fosfato assimilada pelos vegetais aquáticos, sendo de grande importância em pesquisas limnológicas (ESTEVES, 1998).

As principais fontes de ortofosfatos na água são o solo, detergentes, fertilizantes, despejos industriais e esgotos domésticos. O fosfato orgânico é normalmente de menor importância nos esgotos domésticos típicos, mas pode ser importante em águas residuárias industriais. Durante o tratamento de efluentes domésticos e industriais e nos corpos de água receptores, o fosfato orgânico é convertido a ortofosfatos (VON SPERLING, 1995).

Grande parte do fosfato que chega aos ecossistemas aquáticos pode ser precipitada no sedimento. A precipitação (imobilização) depende de fatores físicos,

químicos e físico-químicos como: a concentração de íons ferro, alumínio, sulfeto, compostos orgânicos e carbonatos; pH; condições de oxi-redução. A liberação do íon fosfato precipitado no sedimento pode ocorrer quando o hipolímnio se encontra anaeróbio, em geral, quando o lago se encontra estratificado termicamente (ESTEVES, 1998).

Duas abordagens têm sido utilizadas para calcular o fator de limitação do crescimento de algas, em modelos de qualidade da água, devido aos nutrientes. A primeira é baseada na cinética de Michaelis-Menten e supõe que as taxas de crescimento são determinadas por concentrações externas de nutrientes disponíveis. Concentrações externas se referem à concentração de nutrientes na coluna de água em oposição à concentração interna nas células das algas. Esta abordagem supõe que a composição das células das algas permanece constante, e é geralmente conhecida como modelos de estequiometria fixa. A formulação mais utilizada para combinar os fatores de limitação devido a diferentes nutrientes é a do mínimo fator limitante.

A segunda abordagem se refere aos modelos de estequiometria variável, que consideram que o crescimento de algas se processa em duas etapas: consumo de nutrientes e crescimento ou divisão das células. O crescimento das células depende da concentração de nutrientes dentro das células, ao invés da concentração na água. As taxas de consumo de nutrientes dependem tanto das concentrações externas quanto internas. Uma vez que o consumo de nutrientes e o crescimento são simulados separadamente, a composição de nutrientes nas células pode variar.

Apesar dos modelos de estequiometria variável representarem mais realisticamente o consumo de nutrientes e o crescimento das algas que os modelos de estequiometria fixa, eles requerem uma maior complexidade e um maior custo computacional. Além disso, a variabilidade espacial das concentrações internas e externas de nutrientes complica o transporte, visto que algas com diferentes estequiometrias internas serão transportadas para o mesmo segmento do modelo, requerendo o cálculo de alguma espécie de média a cada passo de tempo. Outra crítica aos modelos de estequiometria variável é a necessidade de um maior número de coeficientes, adicionando incertezas aos resultados do modelo. A base de dados para estes modelos também é bem menor que a dos parâmetros convencionais da equação de Michaelis-Menten.

Muitas das complexidades dos modelos de estequiometria variável podem ser evitadas ao assumir um equilíbrio celular com a concentração externa de nutrientes a cada passo de tempo. Isto permite que o crescimento de algas seja calculado usando a cinética convencional de Michaelis-Menten, mas, ao mesmo tempo, permite que a estequiometria interna das algas varie. As formulações de estequiometria variável são mais importantes para simular com maior precisão a reciclagem de nutrientes que o crescimento de algas. Assim, este esquema pode ser uma combinação razoável entre os modelos de estequiometria fixa e variável.

As formulações da limitação do crescimento de algas relacionado à intensidade de luz consistem de dois componentes: um descrevendo a atenuação da luz com a profundidade e com a concentração de algas e outro que define o efeito da intensidade de luz resultante no crescimento das algas e na fotossíntese. A atenuação da luz através da coluna de água é definida em praticamente todos os modelos pela lei de Beer-Lambert:

$$I(z) = I_0 e^{-k_e z} \quad (16)$$

onde $I(z)$ é a intensidade de luz na profundidade z abaixo da superfície (m), I_0 é a intensidade de luz na superfície ($W\ m^{-2}$) e k_e é o coeficiente de extinção da luz (m^{-1}).

A intensidade de luz na superfície é uma função do local, época do ano, hora do dia, condições meteorológicas e sombreamento por características topográficas e pela vegetação da região. A intensidade de luz na superfície usada em formulações de crescimento de algas corresponde apenas à faixa visível, que tipicamente está em torno de 50% da radiação solar total na superfície. Quase toda radiação fora da faixa visível é absorvida dentro do primeiro metro abaixo da superfície. Além disso, alguns modelos supõem que apenas uma parte da radiação visível (por volta de 50%) é disponível para fotossíntese.

A atenuação da luz em modelos difere primariamente na forma como o coeficiente de extinção (k_e) é formulado. A abordagem mais simples é supor um valor constante para k_e . Esta abordagem é razoável para simulações de curto período ou em períodos em que a turbidez não muda significativamente. Entretanto, em simulações de longo período, k_e deve ser calculado dinamicamente para levar em consideração as variações sazonais na turbidez devido ao crescimento de algas ou variações nas cargas de sólidos suspensos.

O coeficiente de extinção da luz é definido normalmente como uma soma

linear de diversos coeficientes de extinção, que representam a absorção de luz devido a partículas suspensas (fitoplâncton, zooplâncton, particulados orgânicos e inorgânicos), bem como matéria orgânica dissolvida. A equação geral para k_e pode ser descrita por:

$$k_e = k_e' + \sum_{i=1}^n k_{ei} \quad (17)$$

onde k_e' representa um coeficiente base de extinção de luz para a água sem particulados ou matéria orgânica dissolvida (m^{-1}) e k_{ei} representa os coeficientes de extinção de luz devido a cada componente n de absorção de luz (m^{-1}).

Vários modelos incluem os efeitos de todos os componentes, com exceção do fitoplâncton, no coeficiente base de extinção, atribuindo um valor constante. Desta forma, a variação no coeficiente de extinção k_e se torna função apenas da concentração de algas. Esta abordagem fornece uma maneira de incorporar os efeitos do aumento na turbidez devido ao aumento da concentração de algas. Alguns modelos que utilizam esta abordagem usam uma formulação não-linear para descrever a relação entre a concentração de fitoplâncton e o coeficiente de extinção da luz.

O segundo componente das formulações de limitação do crescimento devido à luz representa o fator de limitação $\phi(I)$ na Equação 15. O fator $\phi(I)$ define uma relação entre os níveis de luz no ambiente e a taxa de crescimento das algas ou de fotossíntese. Essencialmente todas as formulações podem ser classificadas em duas categorias: relações de saturação nas quais a taxa de crescimento aumenta linearmente com a luz em baixas intensidades, mas gradualmente diminui em altas intensidades até atingir um valor máximo na intensidade ótima de luz; ou relações de fotoinibição, que são similares às curvas descritas pela primeira categoria abaixo da intensidade ótima de luz, mas que descrevem um decrescimento nas taxas acima da intensidade ótima. As relações de saturação podem ser descritas pela equação de Michaelis-Menten e a relação de fotoinibição mais utilizada é a de Steele, descrita pela Equação 18:

$$\phi(I) = \frac{I}{I_s} e^{1 - \frac{I}{I_s}} \quad (18)$$

onde I_s é a intensidade ótima de luz (W m^{-2}).

Alguns modelos incluem a adaptação à luz nas suas formulações de

limitação, levando em consideração o fato das algas adaptadas a baixas intensidades de luz terem uma resposta mais rápida a mudanças nas condições de luminosidade do que as algas adaptadas a altas intensidades de luz. As algas se adaptam a mudanças nas condições de luz variando a quantidade de clorofila nas suas células, de forma que algas adaptadas a menores intensidades de luz possuem mais clorofila. A razão carbono/clorofila varia tipicamente em torno de 20 a 100 mgC/mgCHla, com 20 correspondendo a baixas intensidades de luz e altas temperaturas, e 100 correspondendo a altas intensidades de luz e baixas temperaturas.

Em modelos de qualidade da água as expressões para o fator de limitação pela luz $\Phi(I)$ são geralmente integrados na direção vertical, já que a intensidade de luz é atenuada com a profundidade. Para realizar a integração, as intensidades de luz I nos fatores de limitação $\Phi(I)$ são substituídas pelas formulações de atenuação da luz com a profundidade, como, por exemplo, a mostrada na Equação 16. Como a luz também varia com o tempo, a maioria dos modelos integra o fator $\Phi(I)$ sobre 24 horas para obter um valor médio diário para uma dada época do ano e um dado conjunto de condições meteorológicas. Isto é realizado geralmente através da multiplicação do fator $\Phi(I)$ pelo fotoperíodo (expresso como a fração do dia com luz solar) e usando uma intensidade média de luz durante as horas do dia como I_0 , na formulação da atenuação de luz. Esta abordagem é utilizada em modelos em regime permanente e em modelos dinâmicos que utilizam passos de tempo da ordem de dias. Uma abordagem alternativa é utilizada quando passos de tempo mais curtos são utilizados, sendo calculada a limitação de luz e o crescimento de algas dinamicamente ao longo do dia usando valores instantâneos de I_0 . Este método simula as variações ao longo do dia na fotossíntese das algas.

A formulação de Michaelis-Menten para limitação de luz integrada no tempo e na profundidade pode ser expressa por:

$$\phi(I) = \frac{f_p}{k_e(z_2 - z_1)} \ln \left(\frac{k_I + I_0 e^{-k_e z_1}}{k_I + I_0 e^{-k_e z_2}} \right) \quad (19)$$

onde f_p é o fotoperíodo, e z_1 e z_2 são as profundidades no topo e no fundo da camada, respectivamente, e k_I é a constante de meia saturação que define a intensidade de luz na qual o crescimento é igual a metade da taxa máxima. Para a formulação de Steele, a expressão integrada no tempo e na profundidade é:

$$\phi(I) = \frac{2.718f_p}{k_e(z_2 - z_1)} \left(e^{-\frac{I_0}{I_s} e^{-k_e z_2}} - e^{-\frac{I_0}{I_s} e^{-k_e z_1}} \right) \quad (20)$$

As perdas de fitoplâncton representadas em modelos de qualidade da água são: respiração, excreção, mortalidade não predatória, herbivoria e sedimentação. A respiração e a excreção de algas são geralmente combinadas e modeladas como um único termo que inclui todas as perdas por processos metabólicos e de excreção. Estas perdas representam a diferença entre o crescimento bruto e o crescimento líquido. Como os valores de crescimento líquido são relatados muitas vezes na literatura, alguns modelos somam as perdas por excreção e respiração ao crescimento bruto, formando um termo único de crescimento líquido, ao invés de simular cada processo separadamente. Entretanto, é geralmente mais apropriado calcular o crescimento e a respiração separadamente, uma vez que o crescimento é dependente da concentração de nutrientes, enquanto a respiração depende primariamente da temperatura. Além disso, a respiração e excreção são componentes importantes da reciclagem de nutrientes.

Como a respiração e a excreção são processos difíceis de serem medidos separadamente, na maioria dos modelos eles são unidos em um único termo de perda constante ou como uma função da temperatura. As funções de temperatura para respiração e excreção utilizam as mesmas formulações discutidas anteriormente para o crescimento, sendo que a equação de Arrhenius é novamente a formulação exponencial mais utilizada. Alguns poucos modelos utilizam formulações que relacionam a taxa de respiração com a condição fisiológica das células das algas, podendo utilizar formulações de estequiometria variável para relacionar a taxa de respiração com o nível interno de carbono nas células.

A mortalidade não predatória se refere às perdas de algas que não são causadas por herbivoria ou por outros processos de perda, como sedimentação, respiração e excreção. Na mortalidade não predatória estão incluídos os processos de senescência, parasitismo, e mortalidade induzida pelo stress devido a deficiências severas nos nutrientes, condições ambientais extremas e substâncias tóxicas. A taxa de mortalidade não predatória é geralmente especificada como um coeficiente constante. Em alguns modelos, funções de ajuste devido à temperatura ou formulações mais complexas são utilizadas para simular estes processos.

As perdas de algas por herbivoria podem ser simuladas de diferentes maneiras, dependendo da maneira como as populações de predadores são simuladas e dos alimentos alternativos disponíveis para os predadores. Quando os predadores não são modelados explicitamente, a dinâmica predador-presa não pode ser simulada. Então, os efeitos da herbivoria são considerados assumindo uma perda constante ou assumindo uma taxa de perda que é diretamente proporcional à densidade de algas. A taxa de herbivoria também pode ser ajustada como função da temperatura.

O zooplâncton herbívoro é incluído em modelos de qualidade da água principalmente por causa do seu efeito na concentração de algas e nutrientes. As algas e o zooplâncton estão intimamente ligados através das interações predador-presa. A dinâmica dos nutrientes também é influenciada pelo zooplâncton, uma vez que a sua excreção é um componente importante da reciclagem de nutrientes. Estas inter-relações são particularmente importantes em simulações de longo período em reservatórios, já que as densidades de algas e do zooplâncton podem variar algumas ordens de magnitude ao longo do ano.

Como no caso do fitoplâncton, a concentração de zooplâncton pode ser simulada como um único grupo, representando o zooplâncton total, ou como diversos grupos funcionais. Estes grupos funcionais podem ser definidos para representar o zooplâncton de acordo com sua alimentação (herbívoros, carnívoros, onívoros, filtradores seletivos ou não seletivos, etc.) ou diferentes grupos taxonômicos (cladóceros, copépodos, rotíferos, etc.). Os modelos com múltiplos grupos representam mais realisticamente as interações tróficas. Entretanto, requerem um maior número de coeficientes, assim como informações mais detalhadas para a calibração.

A dinâmica do zooplâncton é governada pelos mesmos processos gerais que regem a dinâmica do fitoplâncton: crescimento, respiração e excreção, predação e mortalidade não predatória. A maior diferença é que o zooplâncton não está sujeito aos processos de sedimentação, uma vez que eles possuem movimentação própria e migram verticalmente na coluna de água.

A sedimentação de sólidos suspensos, e de substâncias dissolvidas ou adsorvidas nessas partículas, é outro processo importante em modelos de qualidade da água. Os sólidos suspensos podem ser arrastados para o fundo do corpo de água, pela ação da gravidade. Este mecanismo pode ser modelado através da lei de

Stokes. Porém, devido à dificuldade de aplicação dessa lei, a taxa de sedimentação de uma substância particulada é normalmente representada através de uma reação de primeira ordem.

A taxa de sedimentação do fitoplâncton depende da sua densidade, tamanho, forma e estado fisiológico das suas células, da viscosidade e densidade da água, e da turbulência e velocidades do campo de escoamento. A lei de Stokes considera alguns fatores do fitoplâncton e a densidade e viscosidade da água, mas não considera a turbulência e velocidades de escoamento que tendem a manter as algas em suspensão ou ressuspendê-las.

Outros fatores que dificultam a modelagem da sedimentação de fitoplâncton são a formação de vacúolos de gás e de bainhas gelatinosas que tornam algumas espécies flutuantes, e o fato da velocidade de sedimentação variar de acordo com o estado nutricional ou fisiológico das células. Desta maneira, a maioria dos modelos utiliza diretamente a velocidade de sedimentação como um parâmetro de calibração. Apesar da taxa de sedimentação do fitoplâncton ser reduzida em corpos de água relativamente rasos, ainda assim pode contribuir para a mortalidade da população de fitoplâncton (WOOL et al., 2001).

4 METODOLOGIA

O aplicativo utilizado neste trabalho para a modelagem da hidrodinâmica e da qualidade da água foi o SisBaHiA[®] (Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental), desenvolvido pelo Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós Graduação e Pesquisa de Engenharia (COPPE) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ). O SisBaHiA[®] tem sido continuamente aperfeiçoado desde 1987, através de várias dissertações de mestrado e teses de doutorado, além de projetos de pesquisa, sendo adotado em dezenas de estudos e projetos envolvendo modelagem de corpos de água naturais (ROSMAN, 2009).

O SisBaHiA[®] é capaz de realizar a modelagem de corpos de água costeiros e continentais, sendo constituído por um modelo de circulação hidrodinâmica tridimensional (3D) ou bidimensional na horizontal (2DH), um modelo de transporte euleriano advectivo-difusivo com reações, um modelo de qualidade da água e eutrofização, um modelo de transporte lagrangeano determinístico e outro probabilístico, e um modelo de geração de ondas. O modelo de qualidade da água e eutrofização (MQA) do SisBaHiA[®] é baseado no modelo de transporte euleriano advectivo-difusivo integrado na vertical, para escalares não-conservativos, ou seja, que sofrem modificação de concentração através de processos físicos, químicos e biológicos. A integração na direção vertical sugere que este modelo deva ser aplicado em corpos de água rasos, que possuem dimensões horizontais preponderantes sobre a dimensão vertical, com a coluna de água bem misturada, onde a estratificação vertical é pouco relevante. Neste caso, o campo de velocidades usado é médio na vertical, não permitindo a descrição do perfil de velocidades.

No MQA do SisBaHiA[®], o campo de velocidades é conhecido, ou seja, o escalar transportado não altera a hidrodinâmica do corpo de água receptor. Como consequência, a modelagem do padrão hidrodinâmico do corpo de água e a modelagem do transporte do escalar são problemas desacoplados. Entretanto, para que ocorra uma boa simulação do transporte do escalar, uma adequada simulação do campo hidrodinâmico se torna necessária. Tanto o MQA, quanto os demais

modelos de transporte do SisBaHiA[®], podem ser utilizados em escoamentos 2DH ou em camadas selecionadas de escoamentos 3D.

Em relação aos mecanismos de transporte de uma dada substância em um corpo de água, o processo advectivo é normalmente dominante, sugerindo assim uma enorme dependência entre a simulação hidrodinâmica e o processo de transporte. No entanto, os processos difusivos também são muito importantes para a definição do transporte. No MQA do SisBaHIA[®], a parte difusiva é modelada segundo técnicas de filtragem. A equação integrada na direção vertical, descrevendo o transporte de um escalar para variáveis de grande escala e usando a técnica de filtragem para a modelagem da difusão turbulenta, é dada por (ROSMAN, 2009):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(H \left[D_{ij} \delta_{jk} + \frac{\Lambda_k^2}{12} \left| \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \right| \right] \frac{\partial C}{\partial x_k} \right) \pm \sum R_C \quad (21)$$

onde C é a concentração da variável de interesse, U_i são as componentes da velocidade na direção x_i integradas na direção vertical, H é a altura da coluna de água, D_{ij} é o tensor que representa o coeficiente de difusão turbulenta de massa ($i, j = 1, 2$), δ_{jk} representa o delta de Kronecker, Λ_k (igual a $\alpha_k \Delta x_k$) é a largura do filtro na dimensão x_k , sendo α_k um parâmetro de escala ($k = 1, 2, 3$, sendo $k = 3$ correspondente ao tempo t), $\sum R_C$ representa os processos de transformação da variável de interesse. Os valores típicos de α_k calibrados para difusão/advecção são da ordem de 0.25 a 2.0, com valor usual igual a 1.0. As variáveis consideradas no MQA do SisBaHIA[®] são mostradas no Quadro 3.

SÍMBOLO	VARIÁVEL	UNIDADE
a	Clorofila a	$\mu\text{gChla/L}$
z	Zooplâncton Herbívoro	mgC/L
NO	Nitrogênio Orgânico	mgNO/L
NA	Amônia	mgNA/L
NI	Nitrato	mgNI/L
PO	Fósforo Orgânico	mgPO/L
P	Fósforo Inorgânico	mgP/L
L	Demanda Bioquímica de Oxigênio	mgO/L
OD	Oxigênio Dissolvido	mgO/L
T	Temperatura da Água	$^{\circ}\text{C}$
S	Salinidade	mg/L

QUADRO 3 - VARIÁVEIS CONSIDERADAS NO MQA DO SISBAHIA[®]

O coeficiente D_{ij} representa a mistura devida à turbulência gerada principalmente pelo fundo, podendo ser decomposto segundo as direções

longitudinal e transversal:

$$\begin{aligned} D_{xx} &= D_L \cos^2 \varphi + D_T \sin^2 \varphi + D_{xx}^c \\ D_{xy} &= D_{yx} = D_L D_T \sin \varphi \cos \varphi + D_{xy}^c \\ D_{yy} &= D_L \sin^2 \varphi + D_T \cos^2 \varphi + D_{yy}^c \end{aligned} \quad (22)$$

onde D_L e D_T são, respectivamente, os coeficientes nas direções longitudinal e transversal, φ é o ângulo entre a linha de corrente e o eixo x e $D_{xx}^c, D_{xy}^c, D_{yy}^c$ são constantes definidas pelo usuário.

O coeficiente de mistura turbulenta transversal é 40 vezes menor que o longitudinal devido, principalmente, ao fato de que os gradientes de mistura transversais são muito menores que os gradientes longitudinais. No SisBaHIA[®] os coeficientes D_L e D_T são parametrizados por:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha 5.93 u_* H \\ D_T &= \beta 0.15 u_* H \end{aligned} \quad (23)$$

onde α e β são parâmetros incluídos para facilitar a calibração e u_* é a velocidade de atrito característica.

O modelo permite dois tipos de entrada para coeficiente de difusão turbulenta: constante no espaço e no tempo ou variável. Se o coeficiente for constante, apenas os valores de $D_{xx}^c, D_{xy}^c, D_{yy}^c$ são considerados. Se o coeficiente for variável, duas velocidades de atrito serão calculadas, uma associada à tensão na superfície livre (tensão do vento) u_{*S} , e outra associada à tensão do fundo u_{*B} , sendo utilizado o valor máximo. Essas velocidades de atrito são definidas por:

$$u_{*S} = \sqrt{\frac{\tau^S}{\rho_0}}; u_{*B} = \sqrt{\frac{\tau^B}{\rho_0}} \quad (24)$$

onde τ^S e τ^B são as tensões de atrito na superfície livre e no fundo, respectivamente.

A tensão de atrito na superfície livre é uma condição de contorno e pode ser calculada através da equação:

$$\tau_i^S = \rho_{ar} C_D W_{10}^2 \cos \phi_i \quad (25)$$

onde ρ_{ar} é a densidade do ar, C_D é o coeficiente de arraste do vento, W_{10} é o valor local da velocidade do vento medida a 10 metros acima da superfície livre, e ϕ_i é o ângulo entre o vetor de velocidade do vento local e a direção x_i , sendo que $i = 1$

representa a componente x e $i = 2$ a componente y . No SisBaHIA[®] o coeficiente de arraste do vento é determinado pela fórmula:

$$C_D = (0.80 + 0.065W_{10}) \times 10^{-3} \quad (26)$$

onde W_{10} está em metros por segundo.

A tensão de atrito no fundo no módulo 2DH é calculada através da equação:

$$\tau_i^B = \rho_0 \beta U_i \quad (27)$$

Considerando o módulo 2DH desacoplado, o parâmetro β é representado pela equação:

$$\beta = \frac{g}{C_h^2} \sqrt{U^2 + V^2} \quad (28)$$

Onde C_h é o coeficiente de Chézy, definido por:

$$C_h = 18 \log_{10} \left(\frac{6H}{\varepsilon} \right) \quad (29)$$

onde ε é a amplitude da rugosidade equivalente de fundo. Os valores recomendados para ε são mostrados no Quadro 4.

Leito de sedimentos	
Leito com transporte de sedimentos	0.0070m < ε < 0.0500m
Leito com vegetação	0.0500m < ε < 0.1500m
Leito com obstáculos (e.g. pedras, troncos)	0.1500m < ε < 0.4000m
Fundo de pedra ou rochoso	
Fundo de alvenaria	0.0003m < ε < 0.0010m
Fundo de pedra lisa	0.0010m < ε < 0.0030m
Fundo de asfalto	0.0030m < ε < 0.0070m
Fundo com pedregulho	0.0070m < ε < 0.0150m
Fundo com pedras médias	0.0150m < ε < 0.0400m
Fundo com pedras	0.0400m < ε < 0.1000m
Fundo com rochas	0.1000m < ε < 0.2000m
Fundo de Concreto	
Fundo de concreto liso	0.0001m < ε < 0.0005m
Fundo de concreto inacabado	0.0005m < ε < 0.0030m
Fundo de concreto antigo	0.0030m < ε < 0.0100m

QUADRO 4 - VALORES RECOMENDADOS PARA A AMPLITUDE DA RUGOSIDADE EQUIVALENTE DE FUNDO, PARA USO NO MÓDULO 2DH
FONTE: ABBOT E BASCO (1989)

As condições de contorno para o modelo de transporte 2DH são divididas em contorno de terra e contorno aberto, podendo ser escritas de forma geral pela Equação 30 (ROSMAN, 2009):

$$U_N - \left(D_N + \frac{\Lambda_N^2}{12} \left| \frac{\partial U_N}{\partial x_N} \right| \right) \frac{\partial C}{\partial x_N} = \frac{F_N^*}{H} \quad (30)$$

onde o índice N representa a direção normal e F_N^* é a carga afluyente por metro linear. Se no modelo hidrodinâmico for prescrita uma vazão nodal q_N^* ($\text{m}^3/\text{s}/\text{m}$), então:

$$F_N^* = q_N^* C^* \quad (31)$$

Frequentemente, ao longo dos nós do contorno de terra, U_N e F_N^* são iguais a zero e, conseqüentemente, a Equação 30 fica reduzida a:

$$\frac{\partial C}{\partial x_N} = 0 \quad (32)$$

Ao longo dos contornos abertos, os fluxos difusivos são desprezados e duas situações são consideradas. Em situações de efluxo, o modelo resolve a equação de transporte sem considerar os termos difusivos ao longo dos pontos de contorno. Dessa forma, a equação de transporte fica igual a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \sum R \quad (33)$$

Considerando um ponto de contorno com afluxo para o domínio, as condições de contorno são calculadas pelas expressões:

$$\begin{aligned} \text{se } (t-t_0) \leq \tau &\Rightarrow C = C_0 + \frac{C^* - C_0}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{\pi(t-t_0)}{\tau} \right) \right] \\ \text{se } (t-t_0) > \tau &\Rightarrow C = C^* \end{aligned} \quad (34)$$

onde C^* são valores prescritos em qualquer tempo t ; C_0 é o valor da concentração calculada no nó de contorno no instante t_0 , que é o instante imediatamente anterior à mudança de situação de efluxo para afluxo, e τ é um período de transição atribuído pelo modelador.

O esquema de discretização espacial do SisBaHIA[®] permite uma ótima representação de contornos recortados e batimetrias complexas como os encontrados em reservatórios, sendo preferencialmente feita via elementos finitos quadrangulares biquadráticos. Porém, a discretização espacial também pode ser feita utilizando elementos finitos triangulares quadráticos, ou uma combinação de ambos os tipos de elementos. Tal método de discretização espacial é

potencialmente de quarta ordem. O esquema de discretização temporal se baseia no método de diferenças finitas, com erro de truncamento de segunda ordem.

4.1 CONCEPÇÃO DOS PROCESSOS DE TRANSFORMAÇÃO

Os processos de transformação para as variáveis do MQA, definidos neste trabalho, são descritos a seguir:

- Clorofila *a* (fitoplâncton): crescimento, respiração, excreção, mortalidade não-predatória, herbivoria, sedimentação.
- Zooplâncton Herbívoro: crescimento, respiração, excreção, mortalidade não-predatória, predação.
- Nitrogênio Orgânico: amonificação, sedimentação, detritos da herbivoria, excreção de fitoplâncton, excreção de zooplâncton, mortalidade não-predatória de fitoplâncton, mortalidade não-predatória de zooplâncton.
- Amônia: respiração de fitoplâncton, respiração de zooplâncton, mortalidade não-predatória de fitoplâncton, mortalidade não-predatória de zooplâncton, crescimento de fitoplâncton, amonificação, nitrificação.
- Nitrato: nitrificação, desnitrificação, crescimento de fitoplâncton.
- Fósforo Orgânico: excreção de fitoplâncton, excreção de zooplâncton, mortalidade não-predatória de fitoplâncton, mortalidade não-predatória de zooplâncton, detritos da herbivoria, mineralização, sedimentação.
- Fósforo Inorgânico: respiração de fitoplâncton, respiração de zooplâncton, mortalidade não-predatória de fitoplâncton, mortalidade não-predatória de zooplâncton, crescimento de fitoplâncton, mineralização, precipitação.
- Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO): decomposição, sedimentação, detritos da herbivoria, mortalidade não-predatória de fitoplâncton, mortalidade não-predatória de zooplâncton.
- Oxigênio Dissolvido (OD): reaeração, decomposição, nitrificação, fotossíntese, respiração de fitoplâncton, respiração de zooplâncton, demanda de oxigênio no sedimento.

Na Figura 3 até a Figura 6 são mostradas as interações entre as variáveis

através dos processos modelados, sendo que a Figura 3 representa os processos relacionados à dinâmica do fitoplâncton, a Figura 4 representa os processos relacionados ao ciclo do nitrogênio, a Figura 5 representa os processos relacionados ao ciclo do fósforo e a Figura 6 representa os processos relacionados à dinâmica do OD e da DBO.

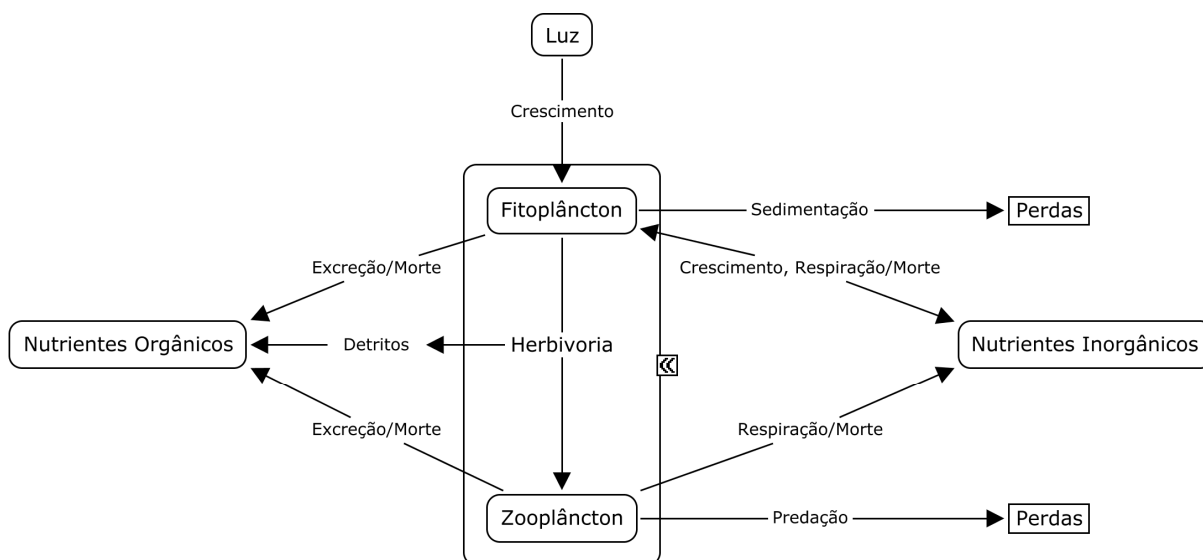


FIGURA 3 - PROCESSOS REPRESENTADOS NA DINÂMICA DO FITOPLÂNTON

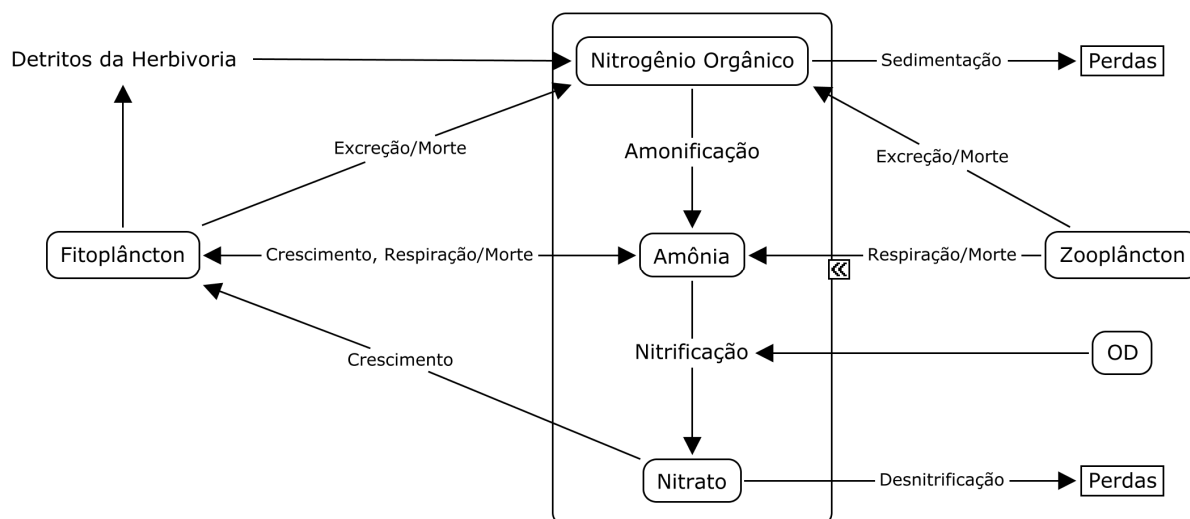


FIGURA 4 - PROCESSOS REPRESENTADOS NO CICLO DO NITROGÊNIO

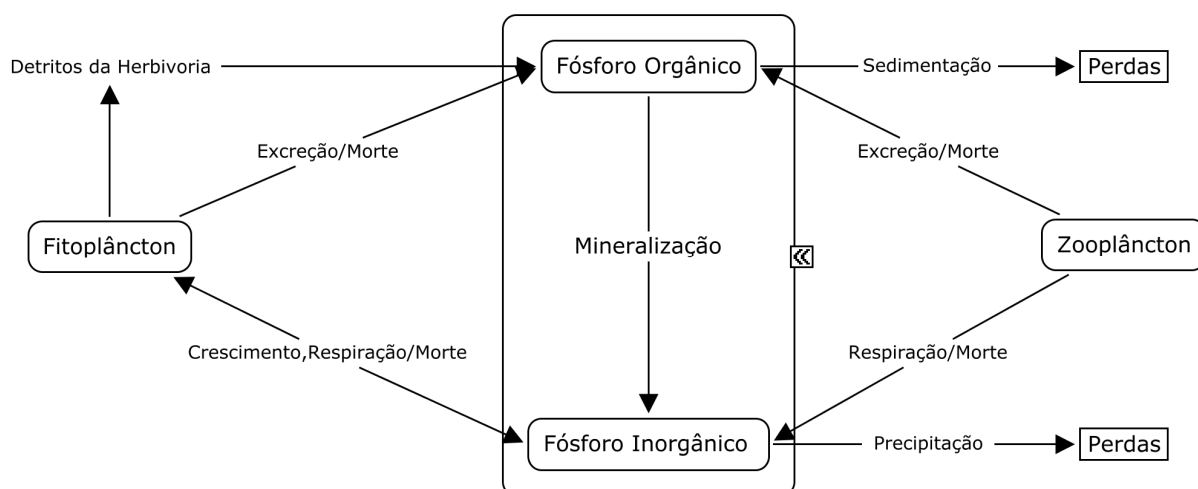


FIGURA 5 - PROCESSOS REPRESENTADOS NO CICLO DO FÓSFORO

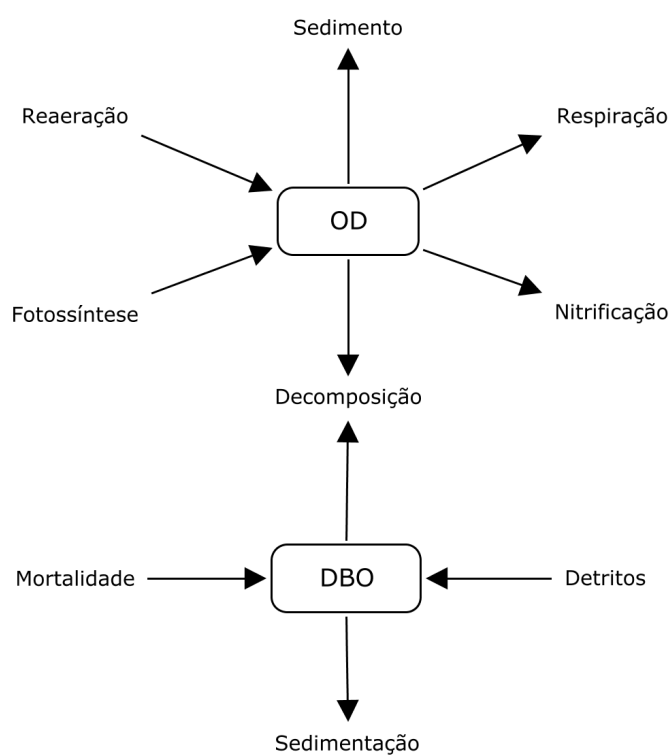


FIGURA 6 - PROCESSOS REPRESENTADOS NA DINÂMICA OD-DBO

4.2 MODELO MATEMÁTICO

A representação dos processos de transformação através de equações matemáticas é mostrada a seguir, sendo descritos os termos de cada equação, assim como os parâmetros utilizados.

4.2.1 Fitoplâncton

$$\sum R_a = \underbrace{k_g a}_{\text{crescimento}} - \underbrace{k_{ra} a}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ea} a}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{k_{gz} a}_{\text{herbivoria}} - \underbrace{\frac{v_s}{H} a}_{\text{sedimentação}} \quad (35)$$

SÍMBOLO	PARÂMETRO
k_g	Taxa de crescimento do fitoplâncton
k_{ra}	Taxa de perdas devido à respiração e excreção
k_{ea}	Taxa de mortalidade não predatória
k_{gz}	Taxa de perdas devido à herbivoria
v_s	Velocidade de sedimentação de fitoplâncton
H	Altura da coluna de água

QUADRO 5 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 35

Crescimento

Neste trabalho, uma taxa de crescimento de algas variável foi utilizada, função da intensidade de luz, disponibilidade de nutrientes e da temperatura. A abordagem escolhida para simular o crescimento de algas foi a da multiplicação dos fatores limitantes. Como neste modelo as algas são simuladas como sendo um único grupo, o ajuste da taxa de crescimento com a temperatura foi realizado através de uma formulação exponencial, descrita pela equação de Arrhenius. Para determinar a limitação do crescimento por nutrientes foi utilizada a cinética de Michaelis-Menten, sendo que os efeitos de cada nutriente foram combinados através do mínimo fator limitante. Apenas o fósforo e o nitrogênio foram considerados como nutrientes limitantes.

A atenuação da luz através da coluna de água foi definida através da lei de

Beer-Lambert. O coeficiente de extinção da luz k_e utilizado foi:

$$k_e = k_e' + 0.0088a + 0.054a^{2/3} \quad (36)$$

onde k_e' é a parte do coeficiente de extinção da luz devido à absorção por partículas suspensas, com exceção das algas, e a é a concentração de algas ($\mu\text{gChla/L}$). Um valor constante de $0,3 \text{ m}^{-1}$ para k_e' foi adotado, sendo um valor típico de reservatórios (CHAPRA, 1997).

O efeito da intensidade de luz no crescimento das algas foi representado através da equação de Steele, que considera os efeitos da fotoinibição. Como a intensidade de luz é atenuada com a profundidade, foi utilizada a equação de Steele integrada ao longo da profundidade. Neste trabalho foram utilizados dados médios de radiação solar a cada hora. Assim, o fotoperíodo, que representa o período do dia com luz solar, foi omitido da equação de Steele.

O modelo completo utilizado para a taxa de crescimento do fitoplâncton, com as considerações citadas acima, pode ser descrito como:

$$k_g = k_g(20)\theta^{T-20} \frac{2.718}{k_e H} \left(e^{-\frac{I_0}{I_s} e^{-k_e H}} - e^{-\frac{I_0}{I_s}} \right) \min \left(\frac{N}{k_{sN} + N}, \frac{P}{k_{sP} + P} \right) \quad (37)$$

onde $k_g(20)$ é a taxa máxima de crescimento a 20°C , sob condições ótimas de luz e com excesso de nutrientes, θ é o fator de correção da temperatura T , H representa a profundidade total da coluna de água, I_0 é a intensidade de luz na superfície, I_s é a intensidade ótima de luz, k_{sN} e k_{sP} são constantes de meia saturação, P representa a concentração de fosfato reativo e N a soma das concentrações de amônia e nitrato. Dentro do modelo I_0 foi multiplicado por 0,5 para representar a fração da radiação solar disponível para o crescimento de algas.

Respiração e excreção

A respiração e a excreção de algas foram combinadas como um único termo k_{ra} que inclui todas as perdas por processos metabólicos e de excreção. Estas perdas representam a diferença entre o crescimento bruto e o crescimento líquido. Além de representarem perdas da concentração de algas, a respiração e a excreção são componentes importantes da reciclagem de nutrientes. Neste modelo, o termo k_{ra} foi descrito como uma função da temperatura através da equação de Arrhenius:

$$k_{ra} = k_{ra}(20)\theta_{ra}^{T-20} \quad (38)$$

onde $k_{ra}(20)$ é a taxa de perdas de fitoplâncton por respiração e excreção a 20°C e θ_{ra} é o fator de correção da temperatura.

Mortalidade não predatória

A taxa de mortalidade não predatória foi modelada como uma constante, não sendo ajustada pela variação da temperatura.

Herbivoria

O zooplâncton herbívoro foi considerado para representar de maneira mais realista o processo de perdas de algas por herbivoria. As equações acopladas das algas e zooplâncton fornecem as principais características para simular as interações predador-presa, já que a taxa de herbivoria é definida como função da densidade de zooplâncton que, por sua vez, varia dinamicamente com a concentração de algas. A taxa de herbivoria foi representada como:

$$k_{gz} = \left(\frac{a}{k_{sa} + a} \right) k_{gz}(20)\theta_{gz}^{T-20} z \quad (39)$$

onde $k_{gz}(20)$ é a taxa de herbivoria na temperatura de 20°C, θ_{gz} é o fator de correção da temperatura e k_{sa} é a constante de meia saturação para herbivoria.

Sedimentação

A velocidade de sedimentação v_s foi modelada como uma constante, não sendo ajustada pela variação da temperatura.

4.2.2 Zooplâncton

$$\sum R_z = \underbrace{r_{ca} E_z k_{gz} a}_{\text{crescimento}} - \underbrace{k_{rz} Z}_{\text{respiração e excreção}} - \underbrace{k_{ez} Z}_{\text{mortalidade}} - \underbrace{k_{gzc} Z}_{\text{predação}} \quad (40)$$

SÍMBOLO	PARÂMETRO
r_{ca}	Razão carbono/clorofila na biomassa das algas
E_z	Eficiência de herbivoria
k_{gz}	Taxa de herbivoria
k_{rz}	Taxa de perdas do zooplâncton por respiração e excreção
k_{ez}	Taxa de perdas do zooplâncton por mortalidade não-predatória
k_{gzc}	Taxa de perdas do zooplâncton por predação

QUADRO 6 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 40

Crescimento

Na formulação do crescimento do zooplâncton, a taxa de herbivoria k_{gz} , descrita anteriormente, foi multiplicada por outros dois coeficientes. O primeiro (r_{ca}) representa a razão carbono/clorofila nas células das algas. No modelo, esta razão foi considerada constante. O segundo coeficiente acrescentado à formulação do crescimento (E_z) é o fator de eficiência de herbivoria. O valor da eficiência varia entre 0 e 1, onde 0 significa nenhuma assimilação e 1 significa assimilação total. Assim, o fator de eficiência define o quanto de biomassa de alga se torna biomassa de zooplâncton, e o quanto é liberado como detrito.

Respiração e excreção

A respiração e a excreção de zooplâncton são representadas de maneira similar à do fitoplâncton através da equação de Arrhenius:

$$k_{rz} = k_{rz}(20) \theta_{rz}^{T-20} \quad (41)$$

onde $k_{rz}(20)$ é a taxa de perdas de zooplâncton por respiração e excreção a 20°C e θ_{rz} é o fator de correção da temperatura.

Mortalidade não predatória

A mortalidade não predatória de zooplâncton se refere aos mesmos processos citados para o fitoplâncton.

Predação

Como neste modelo o zooplâncton herbívoro foi o último nível da cadeia alimentar considerado, a dinâmica entre esta variável e os níveis superiores não pôde ser representada. Assim, a predação por peixes e zooplâncton carnívoro foi modelada através de uma taxa de predação constante, ajustada em função da temperatura:

$$k_{gzc} = k_{gzc}(20)\theta_{gzc}^{T-20} \quad (42)$$

onde $k_{gzc}(20)$ é a taxa de predação do zooplâncton a 20°C e θ_{gzc} é o fator de correção da temperatura.

4.2.3 Nitrogênio

Nitrogênio Orgânico Total

$$\begin{aligned} \sum R_{NO} = & - \underbrace{k_{71}NO}_{\text{amonificação}} - \underbrace{\frac{V_{s3}(1-f_7)}{H}NO}_{\text{sedimentação}} + \underbrace{r_{na}(1-E_z)k_{gz}a}_{\text{detritos da herbivoria}} + \\ & \underbrace{\frac{r_{na}k_{ra}f_{on}a}{r_{ca}}}_{\text{excr. de fitoplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{na}k_{rz}f_{on}Z}{r_{ca}}}_{\text{excr. de zooplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{na}k_{ea}f_{on}a}{r_{ca}}}_{\text{morte de fitoplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{na}k_{ez}f_{on}Z}{r_{ca}}}_{\text{morte de zooplâncton}} \end{aligned} \quad (43)$$

Amônia

$$\begin{aligned} \sum R_{NA} = & \underbrace{\frac{r_{na}k_{ra}(1-f_{on})a}{r_{ca}}}_{\text{resp. de fitoplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{na}k_{rz}(1-f_{on})Z}{r_{ca}}}_{\text{resp. de zooplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{na}k_{ea}(1-f_{on})a}{r_{ca}}}_{\text{morte de fitoplâncton}} + \\ & \underbrace{\frac{r_{na}k_{ez}(1-f_{on})Z}{r_{ca}}}_{\text{morte de zooplâncton}} - \underbrace{\frac{NA}{(k_{am} + NA)}r_{na}k_ga}_{\text{crescimento de fitoplâncton}} + \underbrace{k_{71}NO}_{\text{amonificação}} - \underbrace{k_{12}NA}_{\text{nitrificação}} \end{aligned} \quad (44)$$

Nitrato

$$\sum R_{NI} = \underbrace{k_{12}NA}_{\text{nitrificação}} - \underbrace{k_{2D}NI}_{\text{desnitrificação}} - \underbrace{\left(1 - \frac{NA}{(k_{am} + NA)}\right) r_{na} k_{ga}}_{\text{crescimento de fitoplâncton}} \quad (45)$$

SÍMBOLO	PARÂMETRO
r_{ca}	Razão entre carbono e clorofila
r_{na}	Razão entre nitrogênio e clorofila
E_z	Eficiência de herbivoria
k_{gz}	Taxa de herbivoria
k_{71}	Taxa de amonificação do nitrogênio orgânico
v_{s3}	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas
f_7	Fração de nitrogênio orgânico dissolvido na coluna d'água
k_{ra}	Taxa de perdas devido à respiração e excreção
f_{on}	Fração da respiração e excreção do fitoplâncton e do zooplâncton reciclada para nitrogênio orgânico
k_q	Taxa de crescimento do fitoplâncton
k_{12}	Taxa de nitrificação
k_{rz}	Taxa de perdas do zooplâncton por respiração e excreção
k_{am}	Constante de meia saturação para preferência de amônia
k_{2D}	Taxa de desnitrificação
k_{ez}	Taxa de mortalidade não predatória do zooplâncton
k_{ea}	Taxa de mortalidade não predatória do fitoplâncton
H	Altura da coluna de água

QUADRO 7 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 43, 44 E 45

No modelo de qualidade da água e eutrofização do SisBaHIA[®], o nitrogênio orgânico particulado e o dissolvido estão combinados em um único compartimento indisponível para o crescimento de algas (nitrogênio orgânico total). Outra simplificação do modelo é que, no processo de nitrificação, a oxidação da amônia para nitrato ocorre diretamente, considerando que a transformação de nitrito para nitrato é mais rápida que a transformação de amônia para nitrito. Assim, a concentração de nitrito não é considerada.

Amonificação

Amonificação é a formação de amônia durante o processo de decomposição, tanto anaeróbia como aeróbia, da parte nitrogenada da matéria orgânica dissolvida ou particulada. A taxa de amonificação varia no modelo de acordo com a temperatura, sendo representada através da equação de Arrhenius:

$$k_{71} = k_{71(20)} \theta_{71}^{T-20} \quad (46)$$

onde $k_{71}(20)$ é a taxa de amonificação a 20°C e θ_{71} é o fator de correção da temperatura.

Sedimentação

A parte particulada do nitrogênio orgânico, dada pelo resultado da subtração $(1-f_7)$, sedimenta através da definição de uma velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas (v_{s3}), que é dividida pela profundidade. Os parâmetros f_7 e v_{s3} são constantes.

Detritos da herbivoria

A biomassa do fitoplâncton que não é consumida pelo zooplâncton se torna detrito, liberando nitrogênio orgânico particulado. A quantidade de nitrogênio liberado depende da razão nitrogênio/clorofila no fitoplâncton.

Respiração e excreção

A liberação de nutrientes pelo fitoplâncton e pelo zooplâncton, através da respiração e excreção, é um dos principais componentes da sua reciclagem, sendo modelada como o produto da taxa de respiração e excreção pela estequiometria relacionada ao nutriente no organismo. A porcentagem de nutrientes no zooplâncton foi suposta como sendo igual a do fitoplâncton.

Apesar da respiração e excreção serem simuladas como um único processo na dinâmica do fitoplâncton e do zooplâncton, na dinâmica de nutrientes estes processos são divididos. Assim, a parte de nutrientes liberados pela respiração é transformada em nutrientes inorgânicos, enquanto que a parte liberada pela excreção é transformada em nutrientes orgânicos. No caso do ciclo do nitrogênio, esta divisão foi realizada através da utilização do parâmetro f_{on} , especificado como uma constante, sendo que a amônia é liberada pela respiração e o nitrogênio orgânico é liberado pela excreção.

Mortalidade não predatória

A liberação de nutrientes na coluna de água através da morte não predatória de fitoplâncton e de zooplâncton foi modelada da mesma forma que a respiração e excreção, sendo que uma parte do nitrogênio nas células é transformada em amônia e a outra parte em nitrogênio orgânico.

Crescimento de fitoplâncton

O crescimento de fitoplâncton é resultado da utilização e conversão de nutrientes inorgânicos em material orgânico através do mecanismo da fotossíntese. O nitrato e a amônia são as formas assimiláveis de nitrogênio consideradas no modelo. Para simular a preferência de fitoplâncton por amônia, foi utilizada a cinética de Michelis-Menten, com uma constante de meia saturação k_{am} .

Nitrificação

A oxidação de amônia para nitrato é denominada de nitrificação, ocorrendo predominantemente em ambiente aeróbio. Para considerar os efeitos da temperatura e da concentração de oxigênio na taxa de nitrificação, foram utilizadas as formulações de Arrhenius e de Michaelis-Menten:

$$k_{12} = k_{12}(20)\theta_{12}^{T-20}\left(\frac{OD}{k_{nit} + OD}\right) \quad (47)$$

onde $k_{12}(20)$ é a taxa de nitrificação a 20°C, θ_{12} é o fator de correção da temperatura e k_{nit} é a constante de meia saturação.

Desnitrificação

A desnitrificação é a redução do nitrato a nitrogênio molecular, sendo realizada por bactérias anaeróbias facultativas, predominantemente em meio anaeróbio. Esta reação resulta na perda de nitrogênio para a atmosfera, uma vez que o nitrogênio molecular está na forma gasosa. Como o MQA é integrado na vertical, sendo simulada uma média na coluna de água, as baixas concentrações de

OD encontradas próximas ao fundo não são corretamente representadas. Assim, não foi utilizada a formulação de saturação devido ao OD na taxa de desnitrificação, sendo apenas considerados os efeitos da temperatura:

$$k_{2D} = k_{2D}(20)\theta_{2D}^{T-20} \quad (48)$$

onde $k_{2D}(20)$ é a taxa de nitrificação a 20°C, e θ_{2D} é o fator de correção da temperatura.

4.2.4 Fósforo

Fósforo Orgânico

$$\begin{aligned} \sum R_{PO} = & \underbrace{\frac{r_{pa}k_{ra}f_{op}a}{r_{ca}}}_{\text{excr. de algas}} + \underbrace{\frac{r_{pa}}{r_{ca}}k_{rz}f_{op}z}_{\text{excr. de zooplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{pa}k_{ea}f_{op}a}{r_{ca}}}_{\text{morte de algas}} + \underbrace{\frac{r_{pa}}{r_{ca}}k_{ez}f_{op}z}_{\text{morte de zooplâncton}} + \\ & \underbrace{\frac{r_{pa}(1-E_z)k_{gz}a}{r_{ca}}}_{\text{detritos da herbivoria}} - \underbrace{\frac{k_{83}PO}{r_{ca}}}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{v_{s3}(1-f_{D8})}{H}PO}_{\text{sedimentação}} \end{aligned} \quad (49)$$

Fósforo Inorgânico

$$\begin{aligned} \sum R_P = & \underbrace{\frac{r_{pa}k_{ra}(1-f_{op})a}{r_{ca}}}_{\text{resp. de fitoplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{pa}}{r_{ca}}k_{rz}(1-f_{op})z}_{\text{resp. de zooplâncton}} + \underbrace{\frac{r_{pa}k_{ea}(1-f_{op})a}{r_{ca}}}_{\text{morte de fitoplâncton}} + \\ & \underbrace{\frac{r_{pa}}{r_{ca}}k_{ez}(1-f_{op})z}_{\text{morte de zooplâncton}} - \underbrace{\frac{r_{pa}k_ga}{r_{ca}}}_{\text{cresc. de fitoplâncton}} + \underbrace{\frac{k_{83}PO}{r_{ca}}}_{\text{mineralização}} - \underbrace{\frac{v_{fr}P}{H}}_{\text{precipitação}} \end{aligned} \quad (50)$$

SÍMBOLO	PARÂMETRO
r_{ca}	Razão entre carbono e clorofila no fitoplâncton
r_{pa}	Razão entre fósforo e clorofila no fitoplâncton
E_z	Eficiência de herbivoria
k_{gz}	Taxa de herbivoria
k_{83}	Taxa de mineralização do fosfato não-reativo
v_{s3}	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas
f_{D8}	Fração de fósforo orgânico dissolvido na coluna d'água
k_{ra}	Taxa de perdas de fitoplâncton devido à respiração e excreção
f_{op}	Fração da respiração e excreção do fitoplâncton e do zooplâncton reciclada para fosfato não-reativo
k_g	Taxa de crescimento do fitoplâncton
k_{rz}	Taxa de perdas do zooplâncton por respiração e excreção
v_{fr}	Velocidade de precipitação do fosfato reativo
H	Altura da coluna de água

QUADRO 8 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 49 E 50

A variável fósforo inorgânico utilizada no MQA do SisBaHIA[®] se refere ao fosfato inorgânico dissolvido ou fosfato reativo, que está disponível para o crescimento de algas, enquanto a variável fósforo orgânico é composta por fosfato particulado e fosfato orgânico dissolvido, representando um compartimento que não está disponível para o crescimento de algas.

Detritos da herbivoria

A biomassa do fitoplâncton que não é consumida pelo zooplâncton se torna detrito, liberando fósforo orgânico. A quantidade de fósforo liberado depende da razão fósforo/clorofila no fitoplâncton.

Respiração e excreção

Assim como no ciclo do nitrogênio, a liberação de fósforo por respiração e excreção de fitoplâncton e de zooplâncton foi representada como o produto da sua taxa pela estequiometria relacionada ao fósforo no organismo. No ciclo do fósforo, a parte de nutrientes liberados pela respiração é transformada em fósforo inorgânico, enquanto que a parte liberada pela excreção é transformada em fósforo orgânico. Esta divisão é realizada através do parâmetro f_{op} .

Mortalidade não predatória

A liberação de fósforo na coluna de água através da morte não predatória de fitoplâncton e de zooplâncton foi representada da mesma forma que a respiração e excreção, sendo que uma parte do fósforo no interior das células é liberada sob a forma de fósforo inorgânico e a outra parte sob a forma de fósforo orgânico.

Crescimento de Fitoplâncton

O fósforo inorgânico é a única forma de fósforo assimilável pelo fitoplâncton considerada no modelo.

Mineralização

O fósforo orgânico é decomposto em fósforo inorgânico através da ação de microrganismos. Este processo é simulado, considerando os efeitos da temperatura, através da equação de Arrhenius:

$$k_{83} = k_{83}(20)\theta_{83}^{T-20} \quad (51)$$

onde $k_{83}(20)$ é a taxa de mineralização a 20°C e θ_{83} é o fator de correção da temperatura.

Sedimentação

A parte particulada do fósforo orgânico, dada pelo resultado da subtração ($1-f_{D8}$), sedimenta através da velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas (v_{s3}) dividida pela profundidade. Os valores de f_{D8} e v_{s3} são constantes.

Precipitação

Vários fatores físicos, químicos e físico-químicos interferem na precipitação (imobilização) dos íons fosfato, reduzindo sua concentração na água. Para representar este processo, um termo similar ao da sedimentação foi acrescentado à equação do fósforo inorgânico, representando uma perda para o sedimento.

4.2.5 OD-DBO

Oxigênio Dissolvido

$$\sum R_{OD} = \underbrace{k_a(O_s - OD)}_{\text{reaeração}} - \underbrace{k_D L}_{\text{decomposição}} - \underbrace{r_{on} k_{12} NA}_{\text{nitrificação}} + \underbrace{r_{oc} r_{ca} k_g a}_{\text{fotossíntese}} - \underbrace{r_{oc} r_{ca} k_{ra} a}_{\text{respiração de fitoplâncton}} - \underbrace{r_{oc} k_{rz} Z}_{\text{respiração de zooplâncton}} - \underbrace{\frac{SOD}{H}}_{\text{sedimento}} \quad (52)$$

Demanda Bioquímica de Oxigênio

$$\begin{aligned} \sum R_L = & \underbrace{r_{oc} r_{ca} (1 - E_z) k_{gz} a}_{\text{detritos da herbivoria}} + \underbrace{r_{oc} r_{ca} k_{ea} a}_{\text{morte de fitoplâncton}} \\ & + \underbrace{r_{oc} k_{ez} Z}_{\text{morte de zooplâncton}} - \underbrace{k_D L}_{\text{decomposição}} - \underbrace{\frac{v_{s3}(1 - f_{D5})}{H} L}_{\text{sedimentação}} \end{aligned} \quad (53)$$

SÍMBOLO	PARÂMETRO
k_d	Taxa de decomposição da DBO
k_a	Taxa de reaeração
O_s	Concentração de saturação do oxigênio
r_{on}	Razão de oxigênio consumido por unidade de massa de nitrogênio oxidado no processo total de nitrificação
k_n	Taxa de nitrificação
k_g	Taxa de crescimento do fitoplâncton
k_{ra}	Taxa de perdas de fitoplâncton devido à respiração e excreção
r_{ca}	Razão entre carbono e clorofila no fitoplâncton
E_z	Eficiência de herbivoria
k_{gz}	Taxa de herbivoria
r_{oc}	Quantidade de oxigênio consumido na decomposição de um grama de carbono orgânico
v_{s3}	Velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas
f_{D5}	Fração da DBO dissolvida
H	Altura da coluna de água

QUADRO 9 - PARÂMETROS UTILIZADOS NAS EQUAÇÕES 52 E 53

No MQA do SisBaHIA[®], a DBO é representada apenas pela parte carbonácea, sendo que os efeitos da nitrificação são representados diretamente na equação do oxigênio dissolvido. Neste modelo a DBO₅ é utilizada diretamente, não havendo nenhum tipo de transformação para DBO última, considerada em outros modelos encontrados na literatura.

Decomposição

Diversos fatores influem na taxa de decomposição da matéria orgânica. Neste modelo é considerada a influência da temperatura e da concentração de oxigênio dissolvido. Este efeito é representado através das equações de Arrhenius e de Michaelis-Menten:

$$k_d = k_d(20) \theta_d^{T-20} \left(\frac{OD}{k_{DBO} + OD} \right) \quad (54)$$

onde $k_d(20)$ é a taxa de decomposição a 20°C, θ_d é o fator de correção da

temperatura e k_{DBO} é a constante de meia saturação para o consumo de oxigênio.

Reaeração

A taxa de dissolução do oxigênio na água é proporcional à diferença entre a concentração de saturação e a atual concentração de oxigênio dissolvido. Quando a concentração de oxigênio dissolvido está abaixo da concentração de saturação, há um fluxo de oxigênio da atmosfera para a água. Se a concentração de oxigênio for maior que a de saturação, devido ao processo de fotossíntese, o fluxo de oxigênio será da água para a atmosfera. Existem diversas formulações para a taxa de reaeração em rios, estuários e lagos. A formulação de Wanninkhof para lagos foi considerada neste trabalho, sendo descrita por:

$$k_a = \frac{k_l}{H}, \quad k_l = 0.0986 U_w^{1.64} \quad (55)$$

onde k_l é o coeficiente de transferência de oxigênio na superfície e U_w é a velocidade do vento medida 10 m acima da superfície. No modelo pode ser escolhido um valor constante para a taxa de reaeração. Neste caso, k_a será ajustado pela temperatura:

$$k_a = k_a(20) \theta_a^{T-20} \quad (56)$$

onde $k_a(20)$ é taxa de reaeração na temperatura de 20°C e θ_a é o fator de correção da temperatura para a reaeração.

A concentração de saturação de oxigênio no modelo depende da temperatura e salinidade. As formulações utilizadas para representar a concentração de saturação são:

Concentração de saturação do oxigênio dissolvido em 1 atm (mg L^{-1})

$$\ln O_{st} = -139.34411 + \frac{(1.575701 \times 10^5)}{T_a} - \frac{(6.642308 \times 10^7)}{T_a^2} + \frac{(1.243800 \times 10^{10})}{T_a^3} - \frac{(8.621949 \times 10^{11})}{T_a^4} \quad (57)$$

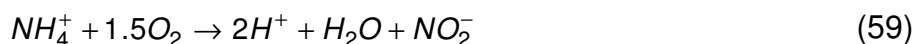
Concentração de saturação do oxigênio dissolvido em água salgada em
1 atm (mg L^{-1})

$$O_{ss} = \exp \left(\ln O_{st} - S \left(1.7674 \times 10^{-2} - \frac{1.07454 \times 10}{T_a} + \frac{2.1407 \times 10^3}{T_a^2} \right) \right) \quad (58)$$

onde T_a é a temperatura absoluta (K) e S é a salinidade (%).

Nitrificação

O processo de nitrificação consome oxigênio podendo causar séria depleção no nível de oxigênio de corpos de água. As etapas da nitrificação são representadas pelas seguintes reações consecutivas:



O oxigênio consumido nas duas etapas deste processo pode ser calculado da seguinte forma:

$$r_{oa} = 1.5(32) / 14 = 3.43 \text{ gO gN}^{-1} \quad (61)$$

$$r_{oi} = 0.5(32) / 14 = 1.14 \text{ gO gN}^{-1} \quad (62)$$

onde r_{oa} e r_{oi} representam a quantidade de oxigênio consumida devido à oxidação de amônia a nitrito e a oxidação de nitrito a nitrato, respectivamente.

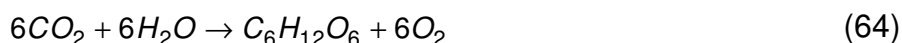
O consumo de oxigênio durante todo o processo pode ser representado como:

$$r_{on} = r_{oa} + r_{oi} = 4.57 \text{ gO gN}^{-1} \quad (63)$$

onde r_{on} é a quantidade de oxigênio consumida por unidade de massa de nitrogênio oxidado no processo total de nitrificação.

Fotossíntese

Durante a fotossíntese, a energia solar é armazenada como energia química nas moléculas de fitoplâncton. Este processo libera oxigênio e consome dióxido de carbono, podendo ser representado simplifadamente pela seguinte expressão:



Esta expressão permite determinar o quanto de oxigênio é produzido quando uma quantidade de carbono orgânico é criada através da fotossíntese:

$$r_{oc} = \frac{6(32)}{6(12)} = 2.67 \text{ gO gC}^{-1} \quad (65)$$

Como o fitoplâncton está representado no modelo através da concentração de clorofila *a* e não de carbono, o valor de r_{oc} é multiplicado pela razão carbono/clorofila nas células das algas.

Respiração

Este processo é oposto ao da fotossíntese, sendo que o oxigênio é consumido e o dióxido de carbono é liberado. A razão r_{oc} agora significa a quantidade de oxigênio consumido na decomposição de um grama de carbono orgânico. Neste trabalho, foram consideradas as perdas de oxigênio devido à respiração de fitoplâncton e de zooplâncton.

Detritos da predação

A parte do fitoplâncton que não foi consumida pelo zooplâncton durante o processo de herbivoria é transformada em DBO. Os detritos são transformados em DBO através da multiplicação das razões r_{oc} e r_{ca} pela concentração de clorofila *a*.

Mortalidade não predatória

As perdas de fitoplâncton e zooplâncton através da mortalidade não predatória são transformadas em DBO seguindo a mesma abordagem utilizada para os detritos da herbivoria.

Sedimentação

Assim como os nutrientes orgânicos, a parte particulada da matéria orgânica, representada no modelo por $(1-f_{D5})$, sedimenta através da velocidade de sedimentação de substâncias orgânicas (v_{s3}) dividida pela profundidade. Os valores de f_{D5} e v_{s3} são constantes.

Demanda de oxigênio no sedimento

A decomposição da matéria orgânica presente nos sedimentos pode representar uma parte significativa do consumo de oxigênio no corpo de água. A demanda de oxigênio no sedimento representada no modelo depende da temperatura, sendo expressa por:

$$SOD = SOD(20)\theta_s^{T-20} \quad (66)$$

onde $SOD(20)$ é a demanda de oxigênio no sedimento na temperatura de 20°C e θ_s é o fator de correção da temperatura.

4.2.6 Temperatura da Água

$$\sum R_T = \frac{1}{H} \frac{H_n}{\rho c} \quad (67)$$

$$H_n = H_s - H_{sr} + H_a - H_{ar} - (H_{br} \pm H_e \pm H_c)$$

Símbolo	Parâmetro
H_n	Fluxo total de calor na interface ar-água
H_s	Fluxo de radiação solar de ondas curtas
H_{sr}	Fluxo de radiação solar de ondas curtas refletidas
H_a	Fluxo de radiação atmosférica de ondas longas
H_{ar}	Fluxo de radiação atmosférica de ondas longas refletidas
H_{br}	Fluxo de radiação de ondas longas da água em direção à atmosfera
H_e	Fluxo de calor por evaporação
H_c	Fluxo de calor por condução
H	Altura da coluna de água
ρ	Densidade da água
c	Calor específico da água

QUADRO 10 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA EQUAÇÃO 67

O conhecimento da temperatura da água é fundamental na simulação da maioria dos processos considerados no MQA. As equações utilizadas para a determinação dos parâmetros necessários ao cálculo da temperatura da água são

descritos a seguir:

$$H_s = I \quad (68)$$

$$H_{sr} = 0,03H_s \quad (69)$$

$$H_a = 11,70 \cdot 10^{-8} (T_a + 273,0)^4 (0,7 + 0,031\sqrt{e_a}) \quad (70)$$

onde I é a radiação solar em W/m^2 , T_a é a temperatura do ar em $^{\circ}C$ e e_a é a pressão de vapor a uma altura da superfície em mm de Hg . A pressão de vapor é calculada pela seguinte equação:

$$e_a = \frac{U_d e_s}{100} \quad (71)$$

onde U_d é a umidade em % e e_s é a pressão de vapor de saturação a temperatura da superfície da água em mm de Hg , que pode ser calculada como:

$$e_s = [0,1001 \exp(0,03(1,8T_s + 32,0)) - 0,0837] 25,4 \quad (72)$$

onde T_s é a temperatura da superfície da água em $^{\circ}C$. No modelo, esta temperatura corresponde a temperatura da coluna de água adicionada de $0,5^{\circ}C$.

$$H_{ar} = 0,03H_a \quad (73)$$

$$H_{br} = 11,349 \cdot 10^{-8} (T_s + 273,0)^4 \quad (74)$$

$$H_e = (19,0 + 0,95W^2)(e_s - e_a) \quad (75)$$

onde W é a velocidade do vento, considerada a mesma usada no modelo hidrodinâmico.

$$H_c = 0,47(19,0 + 0,95W^2)(T_s - T_a) \quad (76)$$

Foram utilizados como entrada dados variáveis de radiação solar, temperatura do ar, umidade relativa e vento a cada 15 minutos de simulação.

4.3 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

O modelo matemático, definido anteriormente para os processos de transformação, foi implementado computacionalmente usando o método das diferenças finitas na discretização temporal e elementos finitos na discretização espacial. Neste trabalho, apenas a discretização temporal das equações do MQA será abordada. Para maiores informações sobre o esquema de discretização espacial, pode-se consultar a referência técnica do SisBaHIA[®] (ROSMAN, 2009).

A ordem de solução das variáveis consideradas no modelo a cada passo de tempo é mostrada na Figura 7. A equação de cada variável do modelo pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = K_{1,m}C_m + K_{2,m} \quad (77)$$

onde C_m é a concentração da variável considerada e $K_{1,m}$ e $K_{2,m}$ são os coeficientes que relacionam os processos de transformação. Considerando os números de cada variável, dados pela Figura 7, e tomando como exemplo a variável nitrato ($m=5$), os valores de $K_{1,m}$ e $K_{2,m}$ são :

$$K_{1,5} = -k_{2D}\theta_{2D}^{C_2-20} \quad (78)$$

$$K_{2,5} = k_{12}\theta_{12}^{C_2-20} \left(\frac{C_{11}}{k_{NIT} + C_{11}} \right) C_4 - \left(1 - \frac{C_4}{k_{am} + C_4} \right) r_{na}k_g C_8 \quad (79)$$

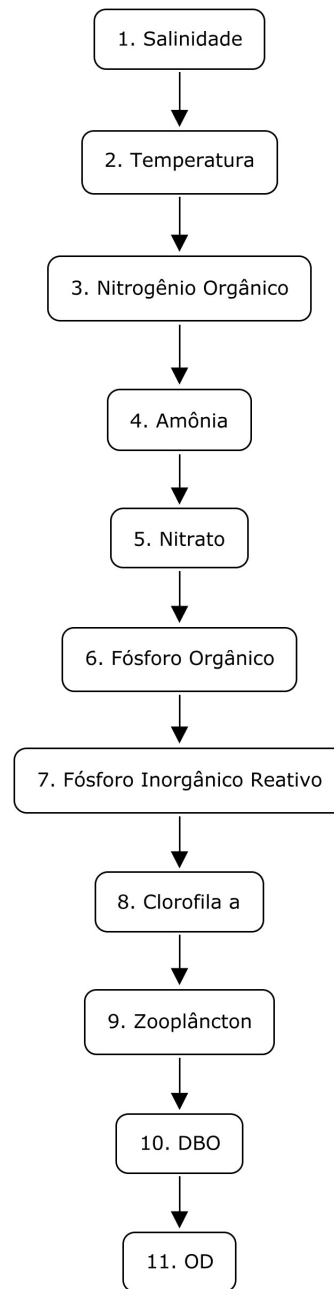


FIGURA 7 - ORDEM DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

Utilizando as aproximações definidas no esquema do fatoramento implícito, as equações discretizadas no tempo são descritas por (CUNHA et al.,2006):

$$\frac{C_m^{n+1} - C_m^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(K_{1,m}^{n+1} C_m^n + K_{1,m}^n C_m^{n+1} \right) + \frac{1}{2} \left(K_{2,m}^{n+1} + K_{2,m}^n \right) \quad (80)$$

onde C_m^{n+1} é a concentração da variável m no tempo $t + \Delta t$, C_m^n é a concentração no tempo t , $K_{1,m}^{n+1}$ e $K_{2,m}^{n+1}$ são os coeficientes no tempo $t + \Delta t$, e $K_{1,m}^n$ e $K_{2,m}^n$ são os

coeficientes no tempo t . Considerando a variável nitrato, os coeficientes da equação discretizada são calculados explicitamente da seguinte maneira:

$$K_{1,5}^n = -k_{2D} \theta_{2D}^{C_2^n - 20} \quad (81)$$

$$K_{1,5}^{n+1} = -k_{2D} \theta_{2D}^{C_2^{n+1} - 20} \quad (82)$$

$$K_{2,5}^n = k_{12} \theta_{12}^{C_2^n - 20} \left(\frac{C_{11}^n}{k_{NIT} + C_{11}^n} \right) C_4^n - \left(1 - \frac{C_4^n}{k_{am} + C_4^n} \right) r_{na} k_g C_8^n \quad (83)$$

$$K_{2,5}^{n+1} = k_{12} \theta_{12}^{C_2^{n+1} - 20} \left(\frac{C_{11}^\otimes}{k_{NIT} + C_{11}^\otimes} \right) C_4^{n+1} - \left(1 - \frac{C_4^{n+1}}{k_{am} + C_4^{n+1}} \right) r_{na} k_g C_8^\otimes \quad (84)$$

onde C_2^n , C_4^n , C_8^n e C_{11}^n são os valores das variáveis temperatura, amônia, clorofila a , e OD, respectivamente, no tempo t ; C_2^{n+1} , C_4^{n+1} são os valores das variáveis temperatura e amônia, respectivamente, no tempo $t + \Delta t$; C_8^\otimes e C_{11}^\otimes são os valores das variáveis clorofila a e OD, respectivamente, extrapolados no tempo $t + 1/2\Delta t$.

Seguindo a sequência de solução mostrada na Figura 7, quando a variável nitrato é calculada, em um determinado passo de tempo, as variáveis OD e clorofila a ainda não foram calculadas. Assim, quando os valores de $K_{1,5}$ e $K_{2,5}$ são determinados no tempo $t + \Delta t$, estas variáveis são extrapoladas. As variáveis temperatura e amônia, que já foram calculadas neste passo de tempo, não precisam ser extrapoladas, sendo adotados os seus valores calculados. Os parâmetros que não são constantes no tempo, como o k_g no caso da equação do nitrato, são calculados antes da solução das equações em cada passo tempo, utilizando valores extrapolados para as variáveis. Para as variáveis extrapoladas, a seguinte aproximação quadrática com três níveis de tempo foi utilizada (CUNHA et al., 2006):

$$G^\otimes = 1.875G - 1.25G^- + 0.37G^= \quad (85)$$

onde G representa as variáveis no tempo t , G^- representa as variáveis no tempo $t - \Delta t$, e $G^=$ representa os valores das variáveis no tempo $t - 2\Delta t$.

4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Uma análise de sensibilidade baseada no método de Monte Carlo foi realizada para compreensão do comportamento geral do MQA. Na análise de Monte Carlo, os parâmetros são caracterizados por uma distribuição de probabilidade. Números aleatórios foram utilizados para gerar uma série de estimativas para os parâmetros. Cada uma destas estimativas foi utilizada para realizar simulações com o modelo.

A distribuição de probabilidade utilizada neste trabalho foi a triangular. A função distribuição acumulada para a distribuição triangular pode ser representada por:

$$F(x) = \begin{cases} \frac{(x-a)^2}{(b-a)(c-a)} & \text{para } a \leq x \leq c \\ 1 - \frac{(b-x)^2}{(b-a)(b-c)} & \text{para } c \leq x \leq b \end{cases} \quad (86)$$

onde a é o valor mínimo, b é o valor máximo, c é o valor usual e x é o valor do parâmetro obtido para um valor de $F(x)$ determinado através de números aleatórios, gerados uniformemente entre 0 e 1. Os valores de a , b e c para cada parâmetro utilizado na análise de sensibilidade foram obtidos da literatura e são mostrados no Apêndice. Desta forma, um programa na linguagem Fortran foi construído para gerar 10.000 conjuntos de parâmetros. Por simplificação, os fatores de correção da temperatura considerados em diversas reações não foram incluídos na análise de sensibilidade.

Devido ao elevado tempo gasto com cada simulação, e do grande número de simulações necessário para realizar a análise de sensibilidade, não foi possível realizar esta análise diretamente no SisBaHIA[®]. Assim, a equação do transporte foi reduzida na dimensão espacial, sendo considerado um sistema completamente misturado, mas utilizando exatamente as mesmas formulações para os processos de transformação do MQA. Desta forma, a equação do balanço de massa para uma determinada variável pode ser representada por:

$$V \frac{dC}{dt} = W_C - QC \pm \sum R_C \quad (87)$$

onde V é o volume do reservatório, C é a concentração da variável de interesse, W_C é a carga da variável de interesse lançada no reservatório, Q é a vazão de saída e $\sum R_C$ representa os processos de transformação da variável de interesse. Para a implementação computacional do modelo foi utilizado o método das diferenças finitas, com as aproximações definidas no esquema do fatoramento implícito descritas anteriormente. Os conjuntos de parâmetros determinados através da distribuição de probabilidades foram utilizados nas simulações. Assim, 10.000 simulações foram realizadas.

As condições de contorno (carga e vazão) e as condições iniciais, necessárias para a solução da equação, foram determinadas a partir dos dados do reservatório do Iraí, mesmo reservatório escolhido para a realização das aplicações com o SisBaHIA[®], que será descrito a seguir. A carga de cada variável foi obtida através da soma das cargas médias em cada tributário do reservatório, e a vazão de saída foi considerada como sendo igual à soma das vazões médias nos tributários. Assim, o modelo foi resolvido considerando um regime permanente. As condições iniciais de cada variável foram impostas de acordo com valores médios de dados obtidos do reservatório. As simulações foram realizadas com o tempo final de simulação igual a um ano, considerado suficiente para o que modelo atingisse o estado de equilíbrio. Restrições foram impostas ao modelo para que não houvesse valores de concentração negativos ou superiores às concentrações máximas encontradas no reservatório. O passo de tempo utilizado foi de 100 segundos.

A contribuição dos parâmetros para os resultados do modelo foi determinada através da análise de correlação aplicada aos seus valores ranqueados (ranking 1 para o menor valor), devido à não-linearidade das relações. O coeficiente de correlação linear pode ser expresso por:

$$r_{yx_i} = \frac{\text{cov}(y, x_i)}{\sqrt{\text{var}(y) \text{var}(x_i)}} = \frac{\sum_{k=1}^N (x_{ki} - \bar{x}_i)(y_k - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{k=1}^N (x_{ki} - \bar{x}_i)^2 \sum_{k=1}^N (y_k - \bar{y})^2}} \quad (88)$$

onde r_{yx_i} é o coeficiente de correlação linear entre os parâmetros x_i e a variável y ; $\text{cov}(y, x_i)$ é a covariância de y e x_i ; $\text{var}(y)$ é variância de y ; $\text{var}(x_i)$ é a variância de x_i ;

x_{ki} e y_k são os valores dos parâmetros x_i e da variável y na k -ésima simulação; e \bar{x}_i e \bar{y} são os valores médios dos parâmetros de entrada x_i e da variável y nas N simulações. O coeficiente de correlação linear indica o grau da relação linear entre x_i e y , sendo que o seu valor varia entre -1 e +1. O sinal indica se a correlação é negativa ou positiva e o valor do coeficiente indica a força da correlação, sendo que valores próximos a -1 ou +1 implicam que a variável y pode ser expressa como uma função linear de x_i .

4.5 APLICAÇÃO DO MQA

A região Metropolitana de Curitiba (RMC) é composta atualmente por 26 municípios, abrigando uma população da ordem de 3,2 milhões de habitantes, aproximadamente 31% da população do Estado do Paraná (IBGE, 2007). O grande desenvolvimento urbano da RMC nos últimos anos está diretamente associado aos problemas enfrentados pelos recursos hídricos: perda de qualidade, disponibilidade restrita e aumento da demanda. A RMC é abastecida em sua maior parte pela bacia hidrográfica do Alto Iguaçu, constituída por dois grandes mananciais de superfície: o sistema Altíssimo Iguaçu e a barragem do Passaúna. Como a região está próxima às cabeceiras, a vazão dos rios é pequena, demandando a construção de reservatórios de grande volume para garantir o abastecimento público. Como consequência, estes reservatórios apresentam grande extensão e longos tempos de residência, favorecendo o acúmulo de cargas expressivas de poluentes e nutrientes. Este problema é agravado pelas condições geomorfológicas da região, que conferem aos reservatórios características morfométricas bastante favoráveis à eutrofização e ao desenvolvimento de algas potencialmente tóxicas (ANDREOLI e CARNEIRO, 2005).

Um dos reservatórios que compõem o sistema de abastecimento da RMC é o reservatório do Iraí. Este reservatório está situado ao leste da RMC na sub-bacia do rio Iraí, que abrange os municípios de Piraquara, Pinhais, Quatro Barras, Campina Grande do Sul e Colombo. Os seus principais tributários (rios Canguiri, Timbu, Cercado e Curralinho) drenam áreas densamente ocupadas, onde existem

atividades industriais e agrícolas, além de áreas de invasão. O reservatório do Iraí teve sua construção finalizada em 1999 e seu primeiro extravasamento em janeiro de 2001, atingindo um volume de 58.000.000 m³ com profundidade média de 4,73 m, área superficial de 14 km², e tempo de residência médio de 527 dias. Segundo Fernandes (2005), o reservatório do Iraí pode ser classificado, em relação à circulação na coluna de água, em polimítico. Esta classificação se refere a lagos, ou à zona lântica de reservatórios, que praticamente não se estratificam termicamente, com períodos de circulação frequentes e que podem ocorrer diariamente.

O reservatório apresentou a primeira elevação significativa da concentração de algas em maio de 2001, evidenciando a forte influência antrópica no processo de eutrofização, além da susceptibilidade imposta pelas próprias condições morfométricas do reservatório. Desde então tem havido eventos de florações de fitoplâncton bastante significativas, comprometendo seriamente a qualidade da água e implicando em elevados custos para o tratamento da água por parte da Companhia de Saneamento do Paraná (SANEPAR). A Figura 8 mostra imagens de florações ocorridas no ano de 2001. Embora tenham sido observadas alterações na composição das espécies fitoplanctônicas ao longo do tempo, a predominância foi basicamente de cianobactérias.

Para minimizar o problema de qualidade da água no reservatório do Iraí, durante os anos de 2002 e 2003 foi realizado o Projeto Interdisciplinar de Pesquisa sobre Eutrofização de Águas de Abastecimento Público na Bacia do Altíssimo Iguaçu. Para avaliar as características físico-químicas da água, durante este projeto foram coletadas amostras mensais em três pontos selecionados no reservatório, no período de abril de 2002 a junho de 2003, totalizando 14 campanhas de coleta. Os três pontos amostrais foram espacialmente distribuídos de modo a representar trechos diferenciados do reservatório, sendo que as coletas das amostras foram realizadas próximas à superfície e ao fundo da coluna de água em cada ponto. As variáveis físico-químicas monitoradas foram (ANDREOLI e CARNEIRO, 2005):

- Demanda Biológica de Oxigênio;
- Demanda Química de Oxigênio;
- Fosfato Total;
- Fosfato Reativo Total;
- Nitrogênio Orgânico;

- Nitrogênio Amoniaco;
- Nitratos;
- Nitritos;
- Potencial Hidrogeniônico;
- Sólidos Dissolvidos Totais;
- Temperatura do Ar;
- Temperatura da Água;
- Turbidez;
- Manganês;
- Ferro;
- Zinco;
- Condutividade Elétrica.



FIGURA 8 - FLORAÇÕES OCORRIDAS EM 2001 NO RESERVATÓRIO DO IRAÍ
FONTE: FERNANDES et al. (2005)

Neste projeto também foram realizadas análises de clorofila *a*, importante indicador da biomassa da comunidade fitoplancctônica. Neste caso, duas coletas ao mês foram realizadas em seis pontos distribuídos no reservatório e em um ponto à jusante do reservatório. As amostras foram coletadas diretamente em frascos e,

portanto, somente próximas à superfície, com exceção de um ponto amostral localizado próximo ao vertedouro, onde três amostras foram coletadas ao longo da coluna de água (próxima à superfície, a 3 m da superfície e próxima ao fundo). Nestes mesmos pontos, também foram realizadas coletas mensais para análise de padrões de abundância e diversidade da comunidade zooplanctônica. A densidade dos rotíferos, cladóceros e copépodos foi quantificada em número de organismos por metro cúbico (org./m³), sendo identificadas 88 espécies, com a maior riqueza (49 espécies) e dominância numérica dos rotíferos (JUNIOR et al., 2005). As variáveis físico-químicas e a concentração de clorofila *a* também foram monitoradas em pontos amostrais localizados nos principais tributários do reservatório.

Devido aos problemas de qualidade da água encontrados e à quantidade de dados obtidos durante o Projeto Interdisciplinar de Pesquisa sobre Eutrofização de Águas de Abastecimento Público na Bacia do Altíssimo Iguaçu, o reservatório do Iraí foi escolhido para as aplicações do MQA do SisBaHIA[®]. Além disso, as características de circulação completa na coluna de água, com pouca estratificação térmica, sugerem que um modelo bidimensional integrado na vertical, como no caso do SisBaHIA[®], possa ser utilizado. O período de simulação adotado foi de 14 meses, referente ao período de coleta de amostras durante este projeto.

A localização da área de estudo e dos pontos de amostragem de clorofila *a* e de zooplâncton é mostrada na Figura 9. A Figura 10 mostra a localização dos pontos amostrais, onde foram feitas coletas para análise das variáveis físico-químicas, nos tributários e no interior do reservatório. As localizações dos pontos amostrais CA2, TI2, CE2 e CU2 foram definidas próximas às fozes dos rios Canguiri, Timbu, Cerrado e Curralinho, respectivamente. O ponto amostral RE1 foi localizado mais a montante da barragem, representando a qualidade da água do seu terço inicial, enquanto o ponto RE3 foi localizado próximo ao vertedouro, representando a qualidade da água que sai do reservatório. A localização do ponto amostral RE2 foi definida entre os dois outros pontos, representando a qualidade da água em uma posição intermediária do reservatório. Na Figura 10 também é mostrado o domínio da modelagem, com o contorno e as profundidades do reservatório. As profundidades foram definidas através da interpolação de curvas de nível digitalizadas, obtidas de mapas topográficos realizados antes do enchimento do reservatório. A malha de elementos finitos quadráticos usada na discretização do domínio é mostrada na

Figura 11, sendo construída utilizando o programa ArgusONE®.

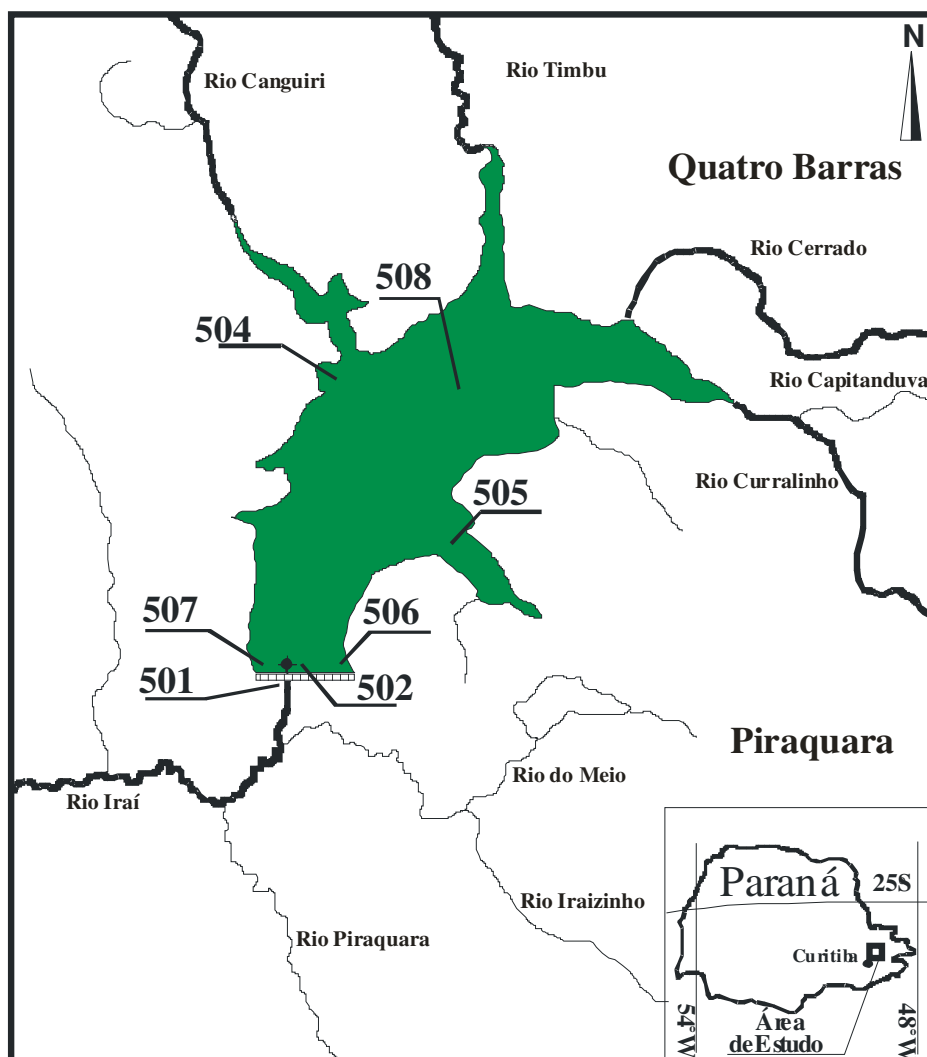


FIGURA 9 - LOCALIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO E DOS PONTOS DE AMOSTRAGEM DE CLOROFILA E DE ZOOPLÂNCTON

FONTE: JUNIOR et al.(2005)

Para a realização de aplicações do MQA no reservatório do Iraí, foi necessário primeiramente definir sua circulação hidrodinâmica durante o período de simulação. Os forçantes utilizados no modelo hidrodinâmico do SisBaHIA® foram as vazões dos tributários e o vento. O modelo hidrodinâmico também necessita da definição de valores de amplitude de rugosidade equivalente de fundo, para a representação física do leito. O valor de amplitude de rugosidade equivalente de fundo utilizado foi igual a 0,02 m em todo domínio, referente a um leito com transporte de sedimentos (ABBOTT e BASCO, 1989).

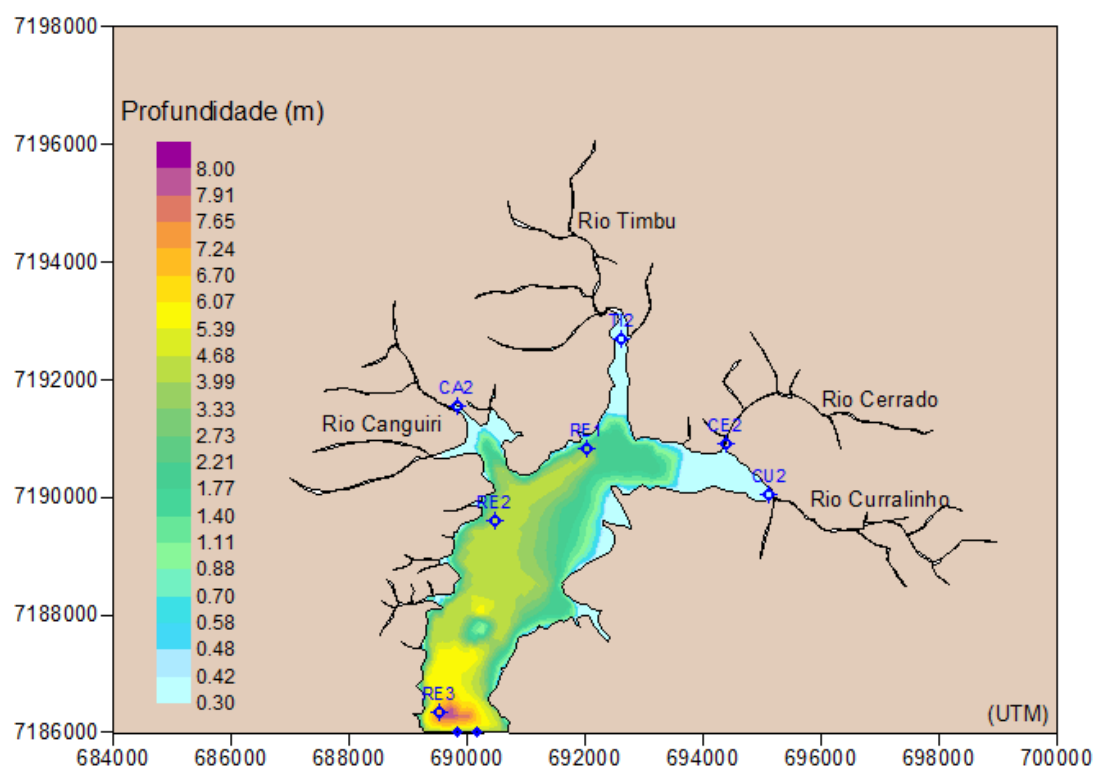


FIGURA 10 - DOMÍNIO DA MODELAGEM NO RESERVATÓRIO DO IRAÍ, PROFUNDIDADES E PONTOS AMOSTRAIS

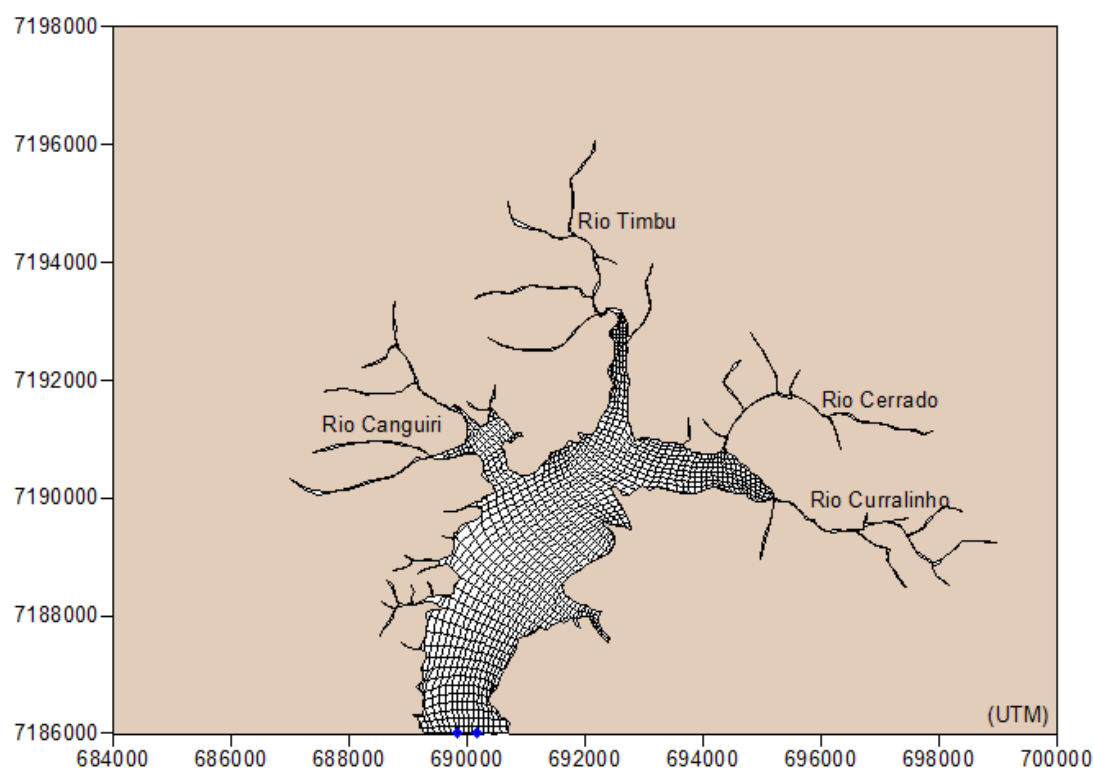


FIGURA 11 - MALHA DE ELEMENTOS FINITOS COM 288 ELEMENTOS E 1333 NÓS

Durante o projeto interdisciplinar, foram realizadas medições das vazões dos tributários do reservatório, nos mesmos pontos de coleta de amostras para análise físico-química da água. O Quadro 11 mostra os valores de vazão e as datas em que foram realizadas as medições em cada ponto. Considerando o intervalo de tempo utilizado na medição das vazões, foram utilizadas as médias dos valores de vazão em cada tributário para gerar as condições de contorno do modelo hidrodinâmico. A vazão do vertedouro do reservatório foi calculada através da soma das médias da vazão nos tributários. Os nós da malha de elementos finitos que representaram as entradas dos tributários e a saída pelo vertedouro foram definidos como fronteira de terra, sendo especificados os fluxos normais ao contorno. Foram especificados ainda três nós de fronteira aberta próximos ao vertedouro, com a prescrição da elevação da superfície livre ao longo do contorno aberto, em qualquer instante, igual a zero. Os parâmetros gerais usados na simulação numérica da circulação hidrodinâmica são mostrados no Quadro 12. Detalhes sobre o modelo de circulação hidrodinâmica podem ser encontrados em Rosman (2009).

DATA	CURRALINHO	TIMBU	CANGUIRI	CERRADO
18/03/02	0,682	0,289	0,132	0,151
21/05/02	0,820	0,045	0,219	0,306
05/06/02	0,220	0,490	0,040	0,077
08/07/02	0,444	0,873	0,288	0,104
22/10/02	0,315	0,074	0,015	0,046
10/12/02	1,402	0,564	0,299	0,178
MÉDIA	0,647	0,389	0,166	0,144

QUADRO 11 - DADOS DE VAZÃO (M³/S) MEDIDOS NOS PONTOS AMOSTRAIS LOCALIZADOS NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

Parâmetros	Valores
α_x (parâmetro de escala na dimensão x)	1,0
α_y (parâmetro de escala na dimensão y)	1,0
Δt (s)	150,0
Constante de Von Karman	0,404

QUADRO 12 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA MODELAGEM HIDRODINÂMICA

Os dados de intensidade e direção do vento para o período de simulação foram obtidos da estação meteorológica do Instituto Tecnológico SIMEPAR localizada no município de Pinhais (latitude: -25.4167° e longitude: -49.1333°). No modelo hidrodinâmico, o vento foi considerado uniforme no espaço e variável no tempo, sendo utilizados valores horários de intensidade e direção. A Figura 12 mostra a rosa dos ventos com os valores registrados no mesmo período em que foi realizada a simulação. Pode-se observar que a direção predominante do vento foi de nordeste, e as intensidades mais frequentes se encontraram na faixa de 1,0 a 2,0 m/s (30,6%), seguida das faixas entre 2,0 e 3,0 (26,2%) e entre 0,0 e 1,0 (21,5%). A velocidade média do vento no período foi igual a 2,04 m/s. Na Figura 13 é possível observar os valores de intensidade do vento ao longo do período de simulação.

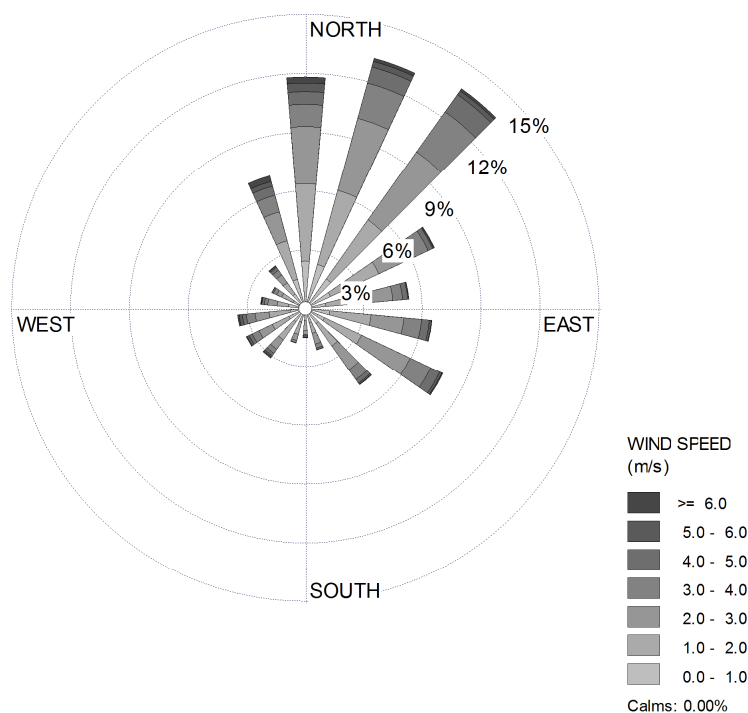


FIGURA 12 - ROSA DOS VENTOS DO PERÍODO DE ABRIL DE 2002 A JUNHO DE 2003, GERADA A PARTIR DOS DADOS DA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE PINHAIS

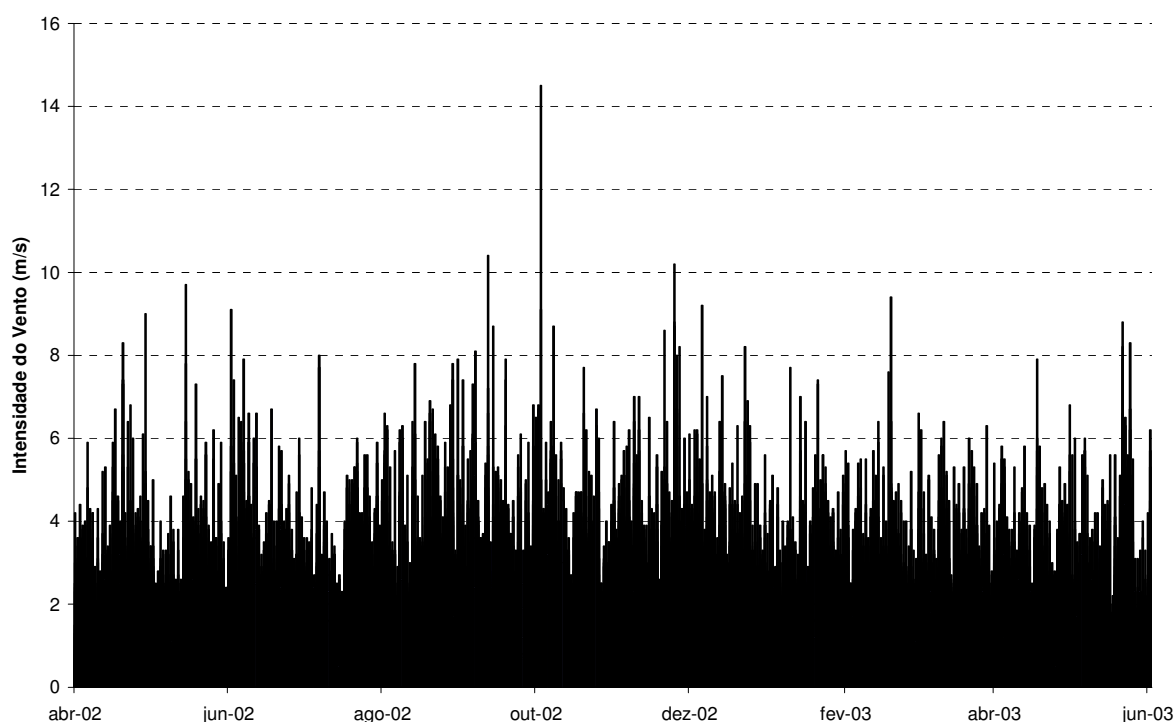


FIGURA 13 – INTENSIDADE DO VENTO AO LONGO DO PERÍODO DE SIMULAÇÃO

Os dados das variáveis físico-químicas monitoradas nos tributários do reservatório do Iraí, durante o Projeto Interdisciplinar de Pesquisa sobre Eutrofização de Águas de Abastecimento Público na Bacia do Altíssimo Iguaçu, foram utilizados como condições de contorno de concentração das variáveis simuladas pelo modelo de qualidade da água e eutrofização do SisBaHIA®. Da Figura 14 à Figura 22 são mostrados os valores de temperatura, nitrogênio amoniacal, nitrato, nitrogênio orgânico, fosfato inorgânico reativo, fosfato orgânico, clorofila a, OD e DBO, utilizados como condição de contorno. Os valores de fosfato orgânico foram encontrados através da subtração dos dados de fosfato total e de fosfato reativo. Pode-se observar nas figuras que os rios Canguiri e Timbu possuem as maiores concentrações de nutrientes e de DBO e as menores concentrações de OD, sendo, portanto, os tributários mais poluídos.

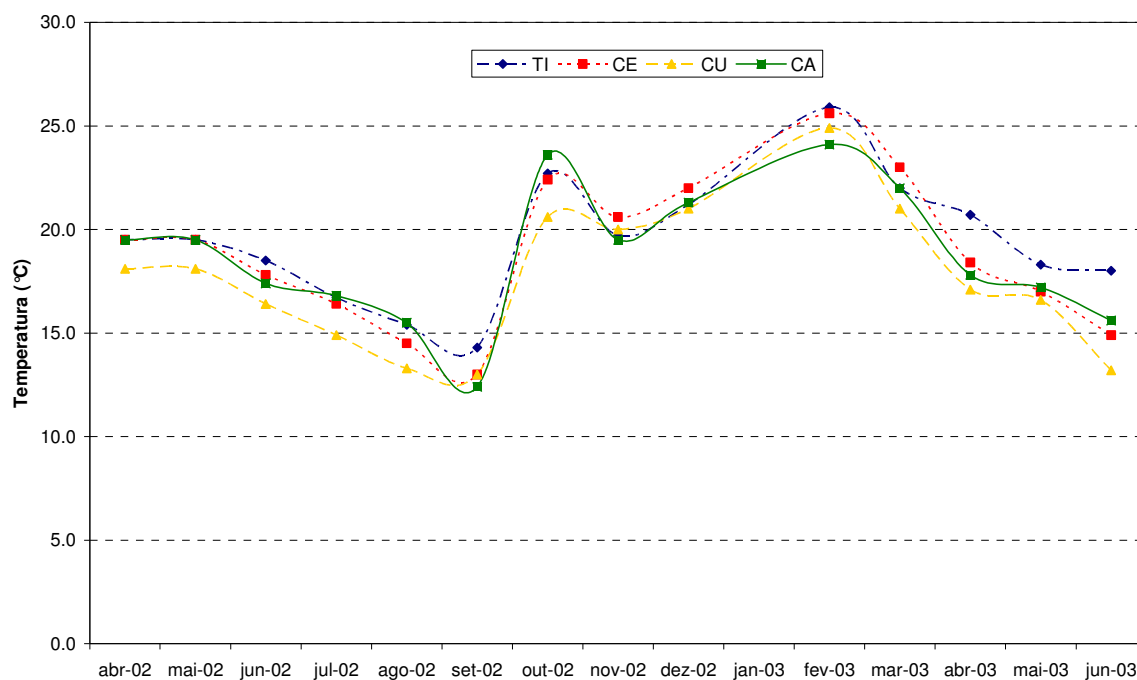


Figura 14 - VALORES DE TEMPERATURA MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

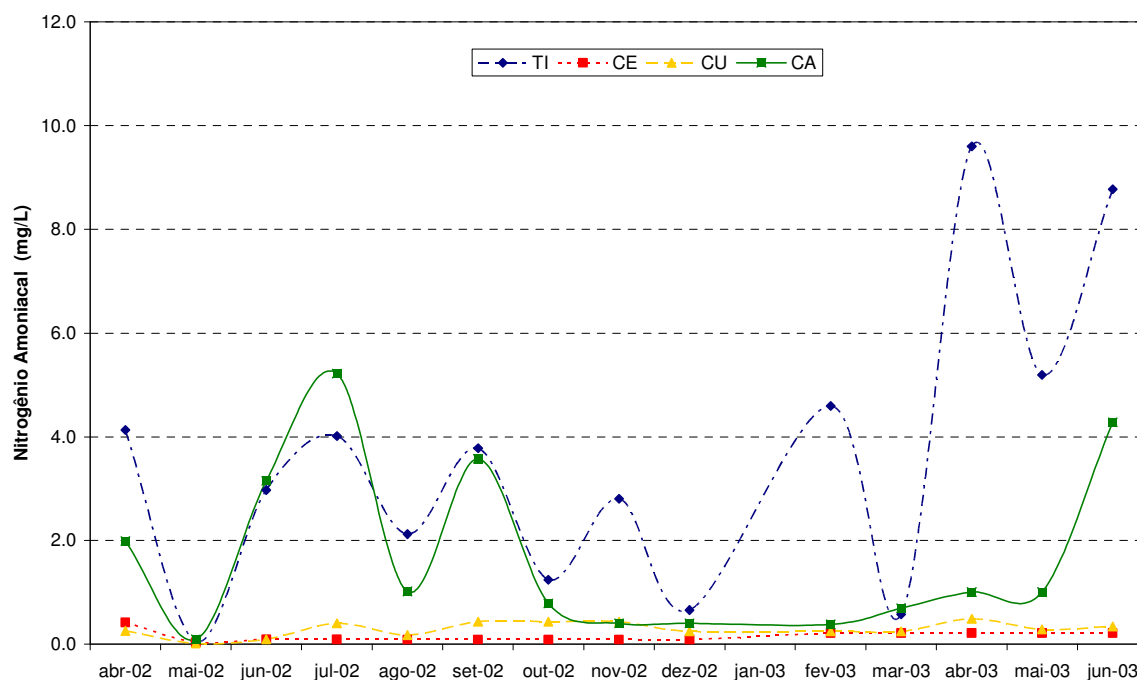


FIGURA 15 - VALORES DE NITROGÊNIO AMONIAICAL MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

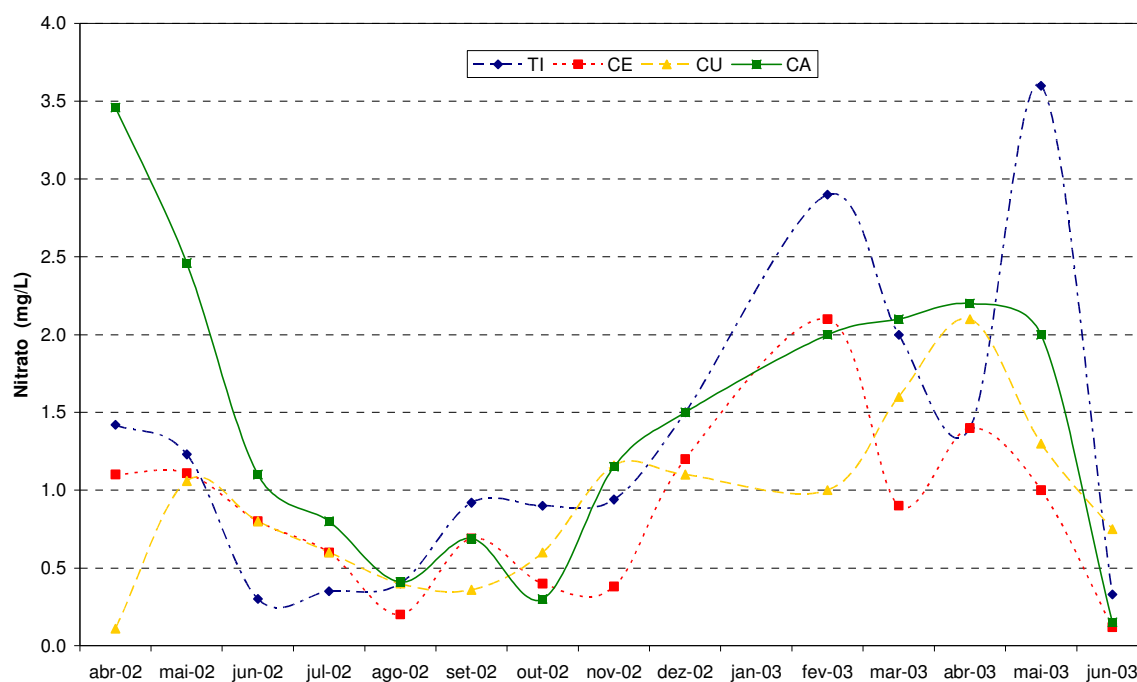


FIGURA 16 - VALORES DE NITRATO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

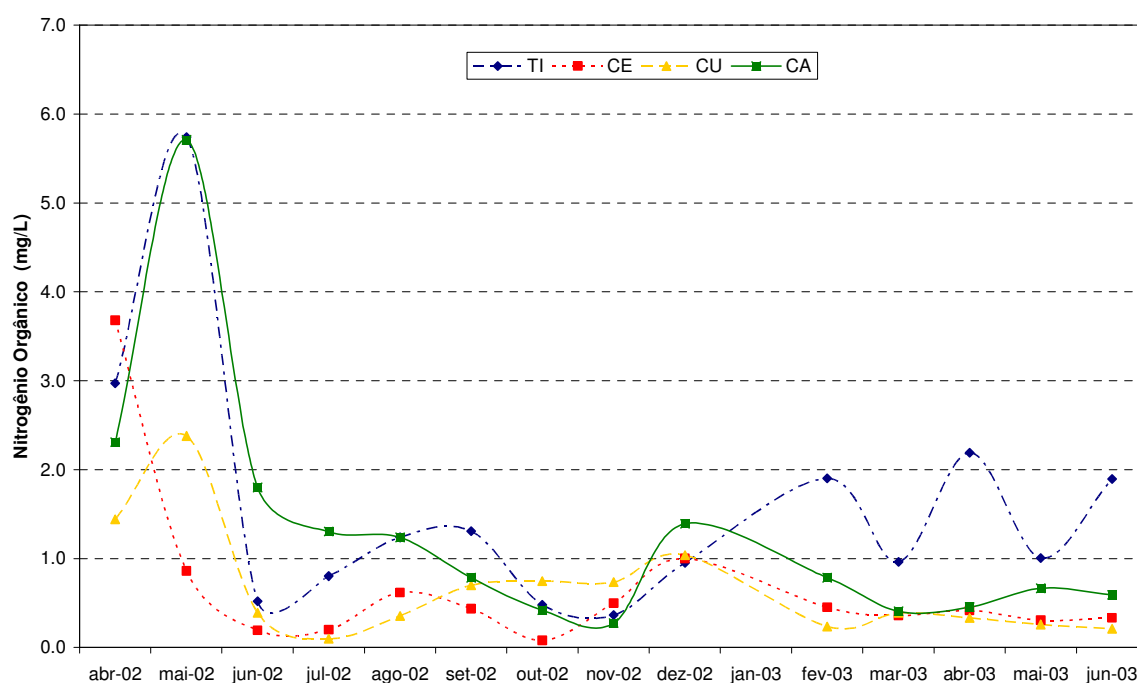


FIGURA 17 - VALORES DE NITROGÊNIO ORGÂNICO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

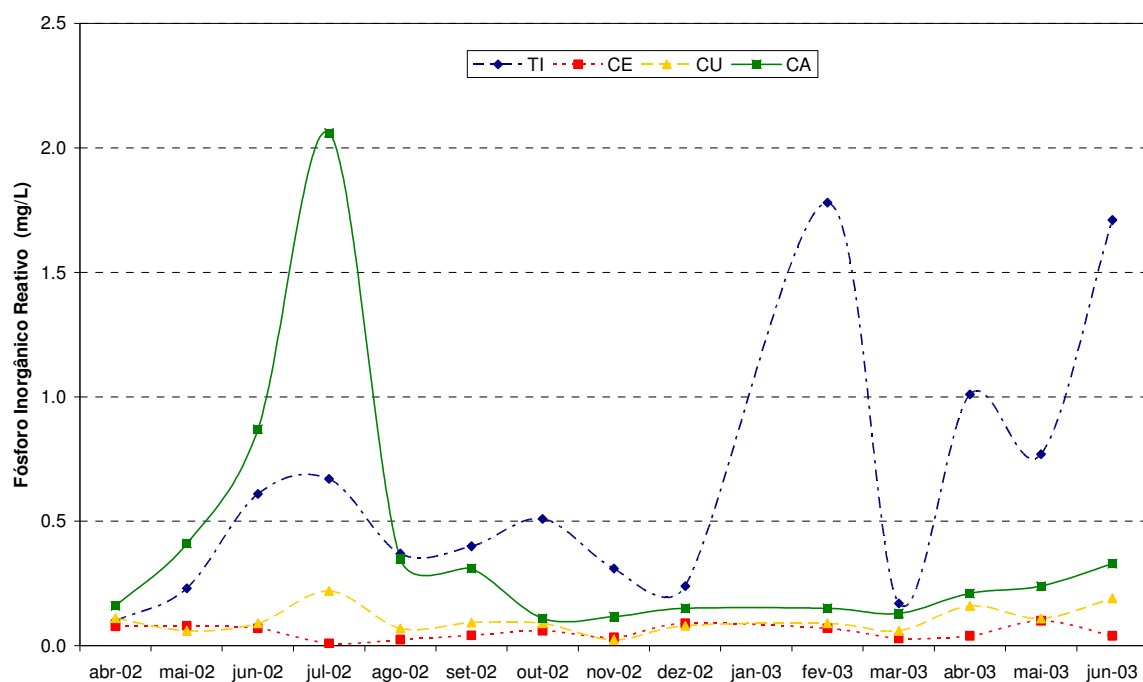


FIGURA 18 - VALORES DE FÓSFORO INORGÂNICO REATIVO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

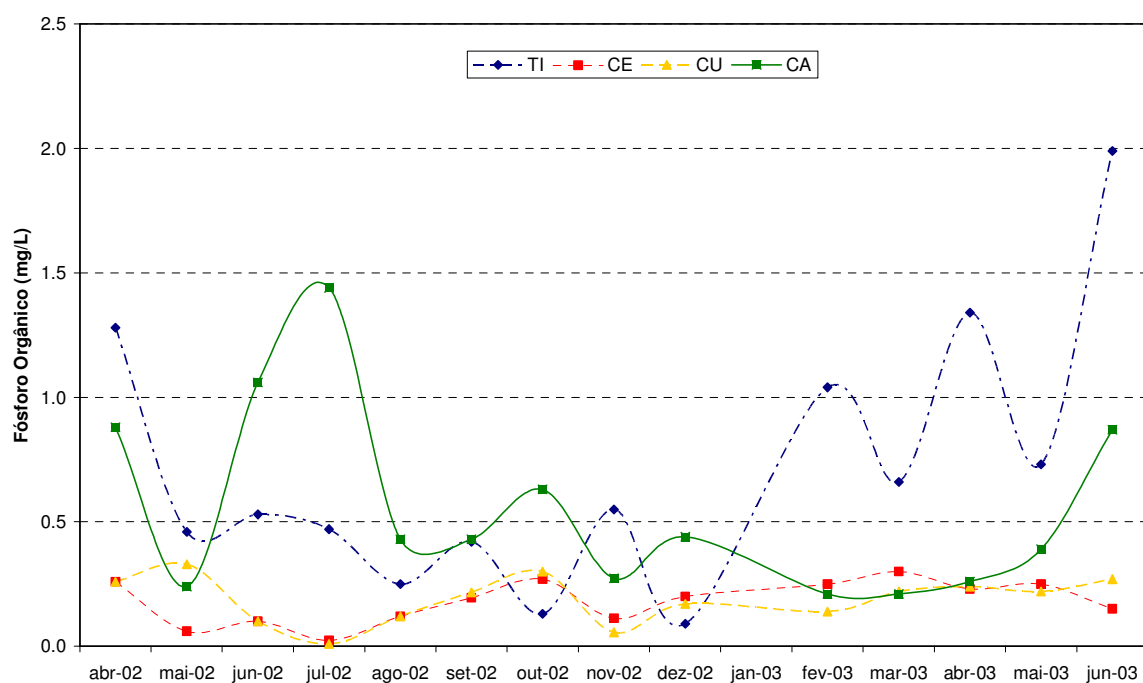


FIGURA 19 - VALORES DE FOSFATO ORGÂNICO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

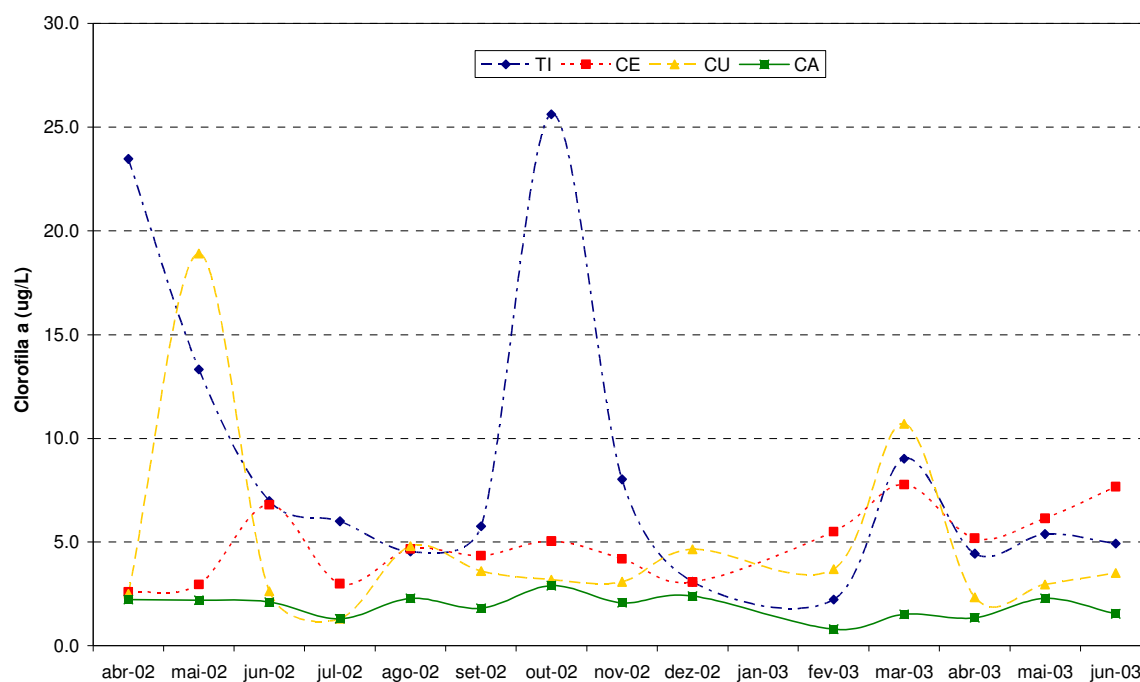


FIGURA 20 - VALORES DE CLOROFILA MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

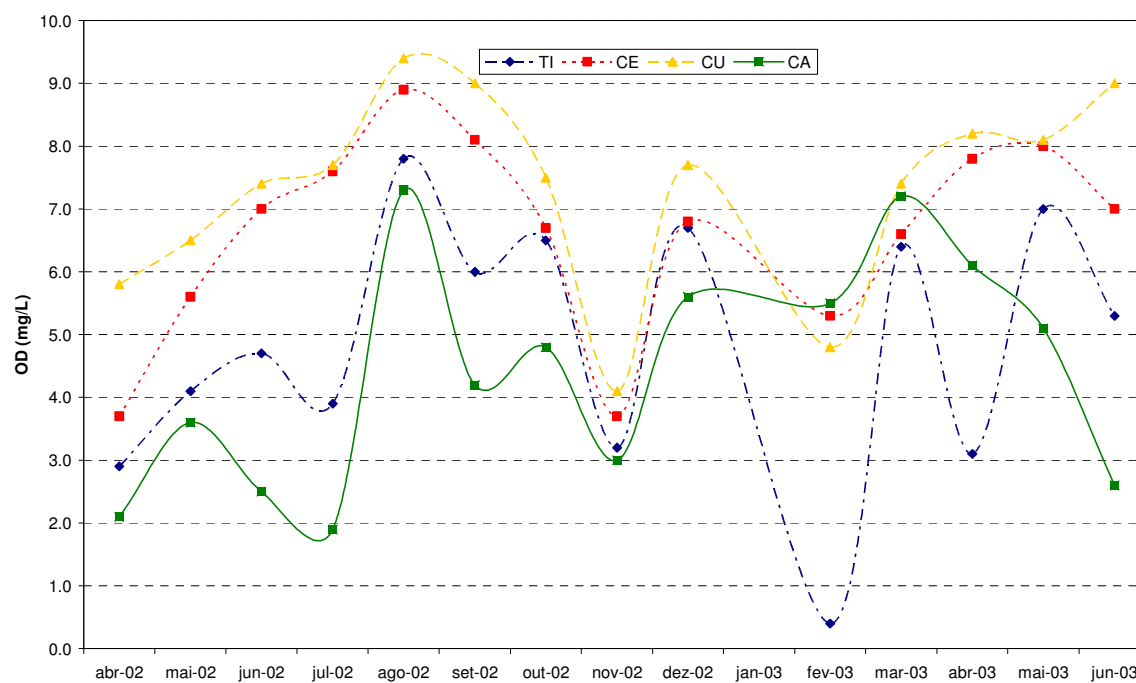


FIGURA 21 - VALORES DE OD MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

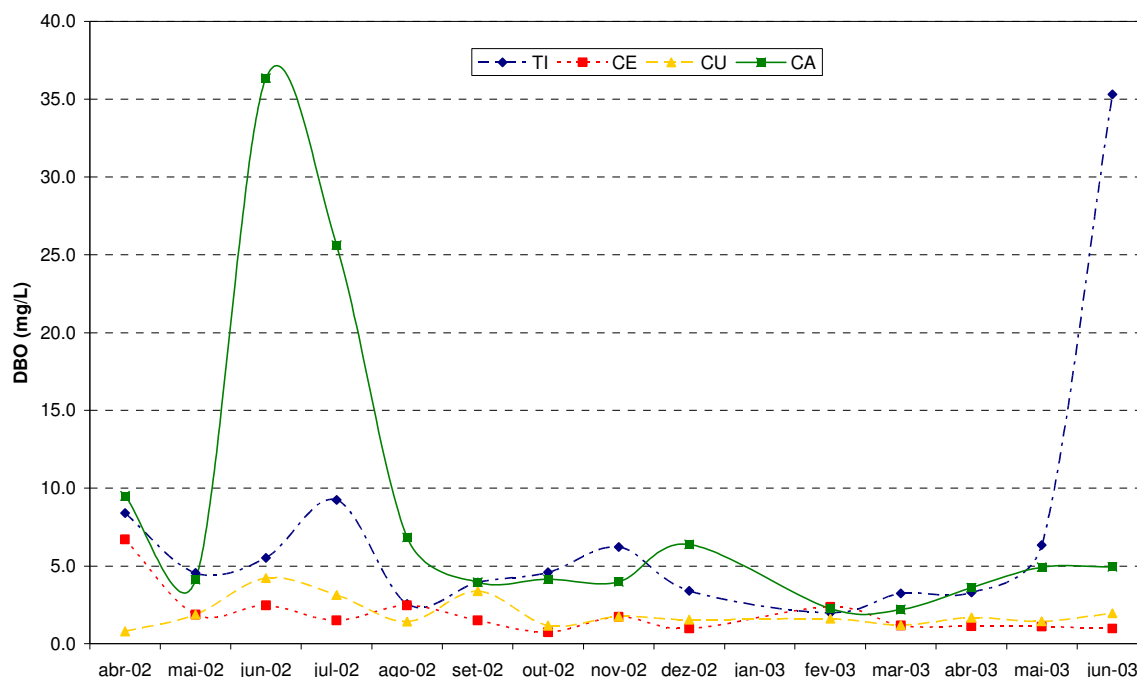


FIGURA 22 - VALORES DE DBO MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NOS TRIBUTÁRIOS DO RESERVATÓRIO DO IRAÍ

Para realizar simulações com o MQA do SisBaHIA[®], também é necessário definir os valores das variáveis meteorológicas: radiação solar, temperatura do ar e umidade relativa. A definição correta destas variáveis é fundamental para o cálculo da temperatura da água que, por sua vez, influi diretamente na maioria dos processos representados pelo modelo. A simulação da temperatura da água também pode ser utilizada para ajustar os coeficientes de dispersão turbulenta. Os valores das variáveis meteorológicas utilizados neste trabalho foram medidos durante o período de abril de 2002 a junho de 2003 na estação do SIMEPAR localizada em Curitiba (latitude: -25.4333° e longitude: -49.2666°), sendo mostrados os valores de radiação na Figura 23, de temperatura do ar na Figura 24 e de umidade relativa na Figura 25.

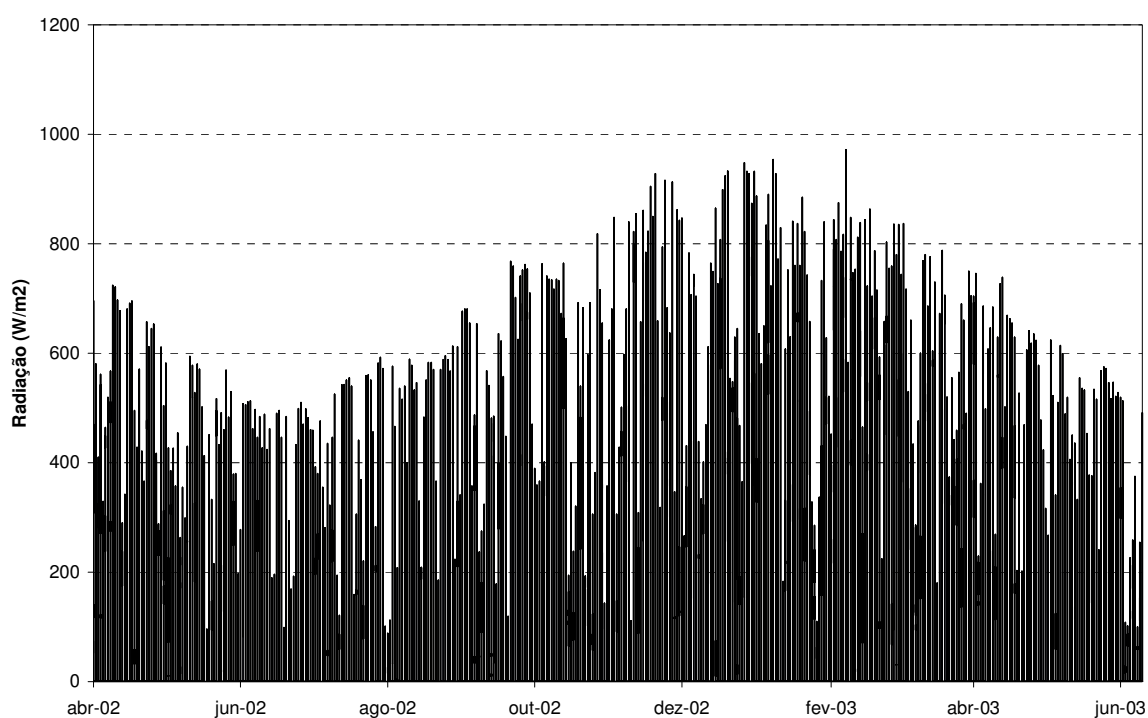


FIGURA 23 - VALORES DE RADIAÇÃO SOLAR MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA

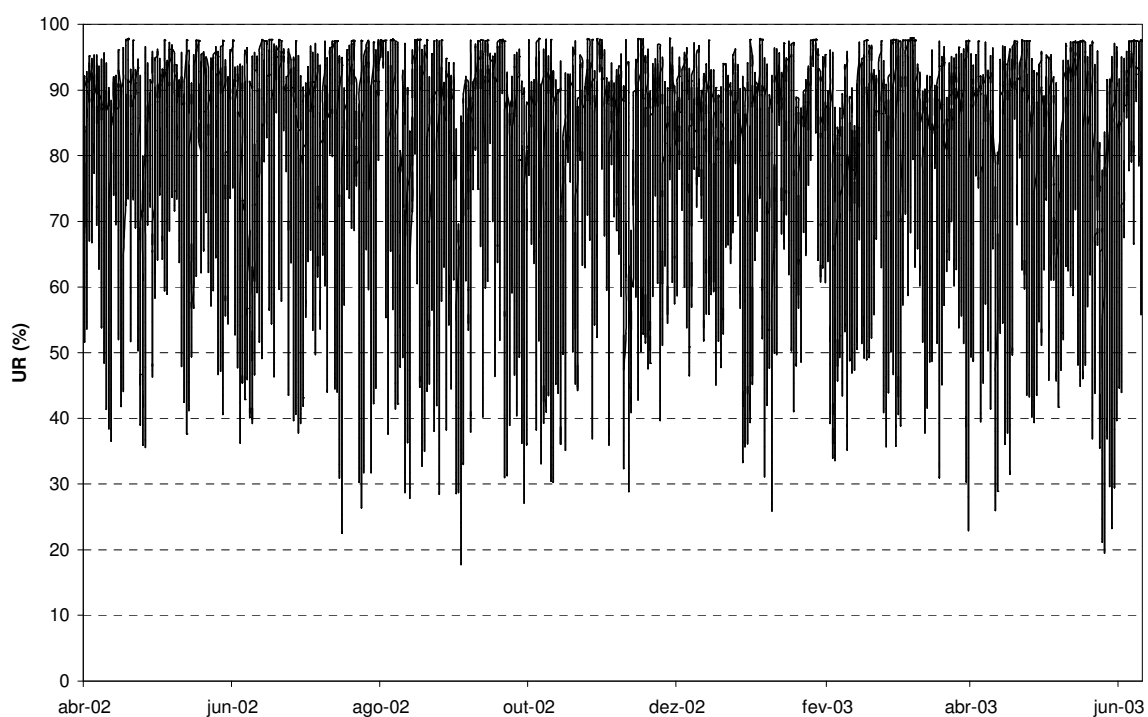


FIGURA 24 - VALORES DE UMIDADE RELATIVA MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA

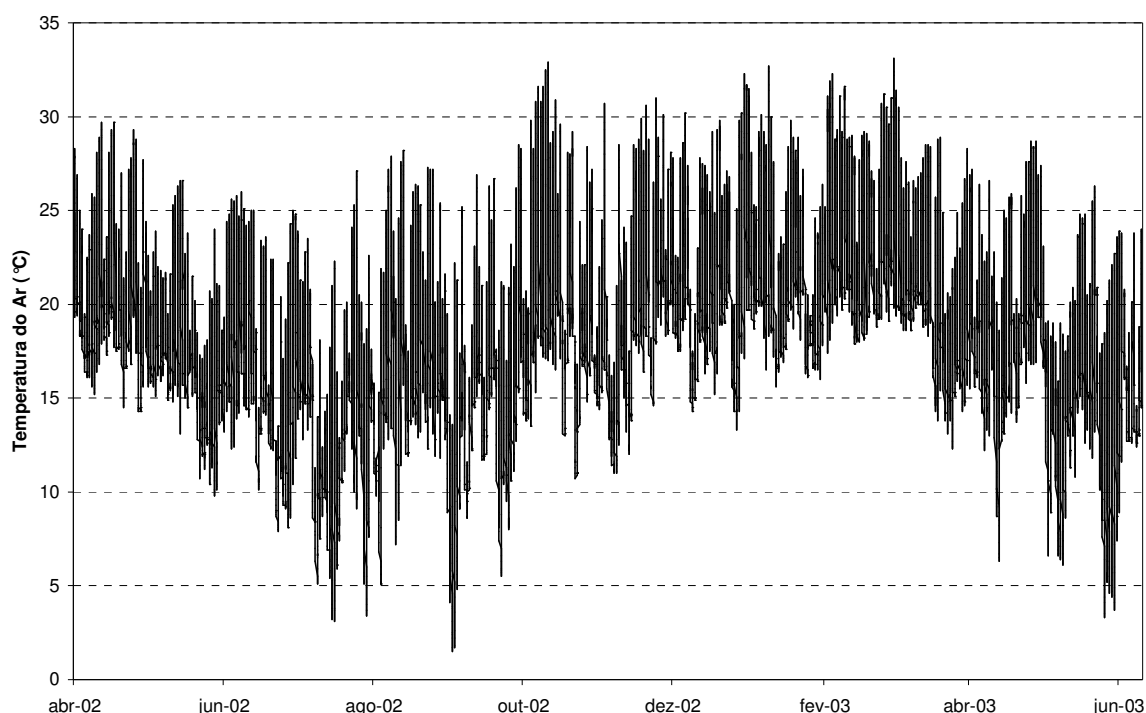


FIGURA 25 - VALORES DE TEMPERATURA DO AR MEDIDOS ENTRE ABRIL DE 2002 E JUNHO DE 2003 NA ESTAÇÃO METEOROLÓGICA DE CURITIBA

Os parâmetros gerais usados na simulação numérica do transporte advectivo e difusivo podem ser observados no Quadro 13. O coeficiente de difusão turbulenta representa a mistura devida à turbulência gerada principalmente pelo fundo, podendo ser decomposto segundo as direções longitudinais e transversais. Fischer (1979) parametrizou o coeficiente de difusão como função das escalas da dispersão longitudinal e transversal, usadas para facilitar a calibração, e da velocidade de atrito característica. Detalhes sobre o modelo de transporte e os parâmetros considerados podem ser encontrados em Cunha *et al.* (2002).

As condições iniciais utilizadas no modelo de qualidade da água e eutrofização do SisBaHIA[®] são mostradas no Quadro 14, sendo determinadas a partir da média das concentrações das variáveis obtidas nos pontos amostrais RE1, RE2 e RE3 no dia 01/04/02, primeiro dia de simulação. Após a definição das condições iniciais e de contorno, simulações foram realizadas para a calibração do modelo. Desta maneira, os valores dos parâmetros foram variados de acordo com a faixa de variação obtida da literatura, mostrada no Apêndice. No ajuste dos parâmetros, foram considerados os resultados da análise de sensibilidade.

Parâmetros	Valores
D_{xx}^c (m ² /s)	2,0
D_{xy}^c (m ² /s)	0,5
D_{yy}^c (m ² /s)	1,0
Δt (s)	300,0
Número de Peclet Maximo	10,0
α (escala da dispersão longitudinal)	1,0
β (escala da dispersão transversal)	1,0
α_x (parâmetro de escala na dimensão x)	1,0
α_y (parâmetro de escala na dimensão y)	1,0
α_t (parâmetro de escala na dimensão t)	1,0

QUADRO 13 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSPORTE ADVECTIVO-DIFUSIVO

VARIÁVEL	CONDIÇÃO INICIAL	UNIDADE
Clorofila a	65,92	µgChla/L
Zooplâncton Herbívoro	0	mgC/L
Nitrogênio Orgânico	3,6	mgNO/L
Amônia	0,2	mgNA/L
Nitrato	0,7	mgNI/L
Fósforo Orgânico	0,13	mgPO/L
Fósforo Inorgânico	0,01	mgP/L
Demanda Bioquímica de Oxigênio	6,16	mgO/L
Oxigênio Dissolvido	5,25	mgO/L
Temperatura	26,0	°C
Salinidade	0	mg/L

QUADRO 14 - CONDIÇÕES INICIAIS UTILIZADAS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE QUALIDADE DA ÁGUA E EUTROFIZAÇÃO

Para verificar a influência da variável zooplâncton herbívoro na dinâmica do fitoplâncton e dos nutrientes, o modelo foi novamente calibrado considerando esta variável. No projeto realizado no reservatório do Iraí, a densidade dos rotíferos, cladóceros e copépodos foi quantificada em org./m³, sendo que a unidade de zooplâncton considerada no MQA é mgC/L. Assim, apesar da estequiometria das células do zooplâncton variar significativamente entre as espécies e de acordo com as condições ambientais, para transformar os dados de zooplâncton em mgC/L foram definidas razões estequiométricas de 0,05 µgC/org. para os rotíferos e 0,075 µgC/org. para os cladóceros e copépodos (TELESH et al., 1998). Desta maneira, um valor aproximado de concentração de zooplâncton pôde ser utilizado como condição inicial para a aplicação do MQA.

A partir dos dados do projeto, foi calculada a média do número de organismos por metro cúbico encontrado nos pontos de amostragem no interior do reservatório do Iraí, no mês de março de 2002. Os resultados encontrados foram

579.995 org./m³ para os rotíferos, 5.904 org./m³ para os cladóceros e 215.593 org./m³ para os copépodos. Utilizando as razões estequiométricas citadas anteriormente, e somando os valores transformados, a concentração média de zooplâncton foi de aproximadamente 0,05 mgC/L. Portanto, este foi o valor considerado para a condição inicial de zooplâncton, com o início da simulação em 01/04/02. Como não foram realizadas coletas para análise de zooplâncton nos tributários, a condição de contorno foi definida como sendo uma ordem de grandeza inferior à condição inicial (0,005 mgC/L). Os valores de condição de contorno e condição inicial das outras variáveis foram mantidos. A calibração do MQA foi realizada através da variação dos parâmetros relacionados diretamente às variáveis zooplâncton herbívoro e clorofila *a*, sendo mantidos os valores dos outros parâmetros encontrados na calibração anterior.

Após o término do projeto realizado no reservatório do Iraí, não foram realizadas novas campanhas de coleta, para análise da qualidade da água no reservatório e em seus tributários, com uma frequência suficiente que permitisse a validação do modelo a partir de um novo conjunto de dados. Apesar disso, novas simulações foram realizadas para verificar as respostas do modelo quanto a mudanças na concentração de entrada de nutrientes. O nutriente limitante no reservatório do Iraí foi definido através da determinação da razão entre as concentrações médias de nitrogênio inorgânico (amônia e nitrato) e de fosfato reativo, obtidas nos pontos amostrais localizados no interior do reservatório. Como citado anteriormente, se esta razão for bem maior que 7,2, o fósforo pode ser considerado como o nutriente limitante. Os valores encontrados foram:

- RE1: N/P=24;
- RE2: N/P=41;
- RE3: N/P=41.

Assim, mudanças da concentração de fósforo devem resultar em maiores impactos na dinâmica do fitoplâncton.

Desta maneira, foram realizadas simulações com o MQA considerando cenários com mudanças nas concentrações de fósforo nos tributários do reservatório do Iraí. No cenário 1, as concentrações de fosfato reativo e de fosfato orgânico medidas nos tributários foram multiplicadas por dez. No cenário 2, estas concentrações foram divididas por dez. Nos dois cenários foram mantidas as

condições iniciais mostradas anteriormente no Quadro 14 e as condições de contorno das outras variáveis. Cada cenário foi simulado sem considerar e considerando a variável zooplâncton herbívoro, utilizando os mesmos valores dos parâmetros do MQA obtidos durante as calibrações.

5 RESULTADOS

5.1 CORRELAÇÃO ENTRE AS VARIÁVEIS E OS PARÂMETROS DO MQA

Os parâmetros que mais influenciam nos resultados das variáveis do MQA foram identificados através da análise de sensibilidade realizada. A cada um dos parâmetros utilizados nesta análise, foi atribuída uma faixa de valores e um valor comum baseados na literatura, sendo a distribuição triangular utilizada para descrever a variabilidade do parâmetro. A forma da distribuição e as interdependências entre os parâmetros podem desempenhar um papel importante nos resultados da análise de sensibilidade. Os valores de correlação linear encontrados entre os valores ranqueados das variáveis e dos parâmetros do MQA, para as 10.000 simulações realizadas, são mostrados na Tabela 1.

Para facilitar a visualização dos resultados, na Tabela 2 os parâmetros foram ordenados de acordo com o grau de correlação com as variáveis, indo do maior grau para o menor. Os significados dos parâmetros, assim como a faixa de valores e o valor comum utilizados na análise de sensibilidade, são mostrados no Apêndice. A partir desta análise, foi possível compreender o comportamento geral do MQA, auxiliando no processo de calibração.

TABELA 1 - VALORES DE CORRELAÇÃO LINEAR ENTRE AS VARIÁVEIS E OS PARÂMETROS DO MQA (VALORES EM VERMELHO POSSUEM SIGNIFICÂNCIA PARA $P < 0,05$)

Variável / Parâmetro	NA	NI	Z	NO	P	PO	L	OD	a
kg(20)	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.14
ksN	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.04
ksP	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.10
Is	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.03
ksa	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01
kgz(20)	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01
kra(20)	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.71
krz(20)	0.01	0.01	-0.92	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.02
Ez	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01
kgzc(20)	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.01
fon	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
kam	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01
rca	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
fD5	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0.19	-0.01	0.01
fD7	0.19	0.09	-0.01	0.79	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
fD8	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.18	0.37	0.00	-0.02	0.02
fop	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
k12(20)	-0.96	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01
k2D(20)	0.01	-0.99	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.03
k71(20)	0.13	0.07	-0.01	-0.41	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
k83(20)	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.29	-0.86	0.01	0.00	0.01
ka(20)	-0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.72	0.01
kD(20)	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.93	0.00	0.02
kDBO	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
kNIT	0.09	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
kea	0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.14
kez	0.00	0.00	-0.30	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00
SOD(20)	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.64	-0.02
vs3	-0.08	-0.03	-0.01	-0.36	-0.14	-0.24	-0.25	0.03	-0.02
vs4	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.61
vfr	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.90	0.00	-0.02	0.00	-0.09
rna	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02
rpa	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01

TABELA 2 - PARÂMETROS ORDENADOS SEGUNDO O GRAU DE CORRELAÇÃO COM AS VARIÁVEIS (PARÂMETROS EM VERMELHO POSSUEM CORRELAÇÃO NEGATIVA COM A VARIÁVEL)

Grau de correlação/ Variável	1	2	3
NA	k12(20)	fD7	k71(20)
NI	k2D(20)	fD7	k71(20)
Z	krz(20)	kez	kgzc(20)
NO	fD7	k71(20)	vs3
P	vfr	k83(20)	fD8
PO	k83(20)	fD8	vs3
L	kD(20)	vs3	fD5
OD	ka(20)	SOD(20)	vs3, kg(20)
a	kra(20)	vs4	Kea, kg(20)

5.2 CIRCULAÇÃO HIDRODINÂMICA

Os transportes advectivo e difusivo têm forte relação com o padrão de circulação hidrodinâmica do corpo de água. Assim, antes das aplicações com o MQA, a circulação hidrodinâmica para o período de simulação foi determinada através do modelo hidrodinâmico do SisBaHIA®. Na

Figura 26 observa-se o campo de velocidades para um instante de simulação com vento igual a 9,5 m.s⁻¹ na direção nordeste, sendo a maior intensidade de vento utilizada como forçante do modelo hidrodinâmico.

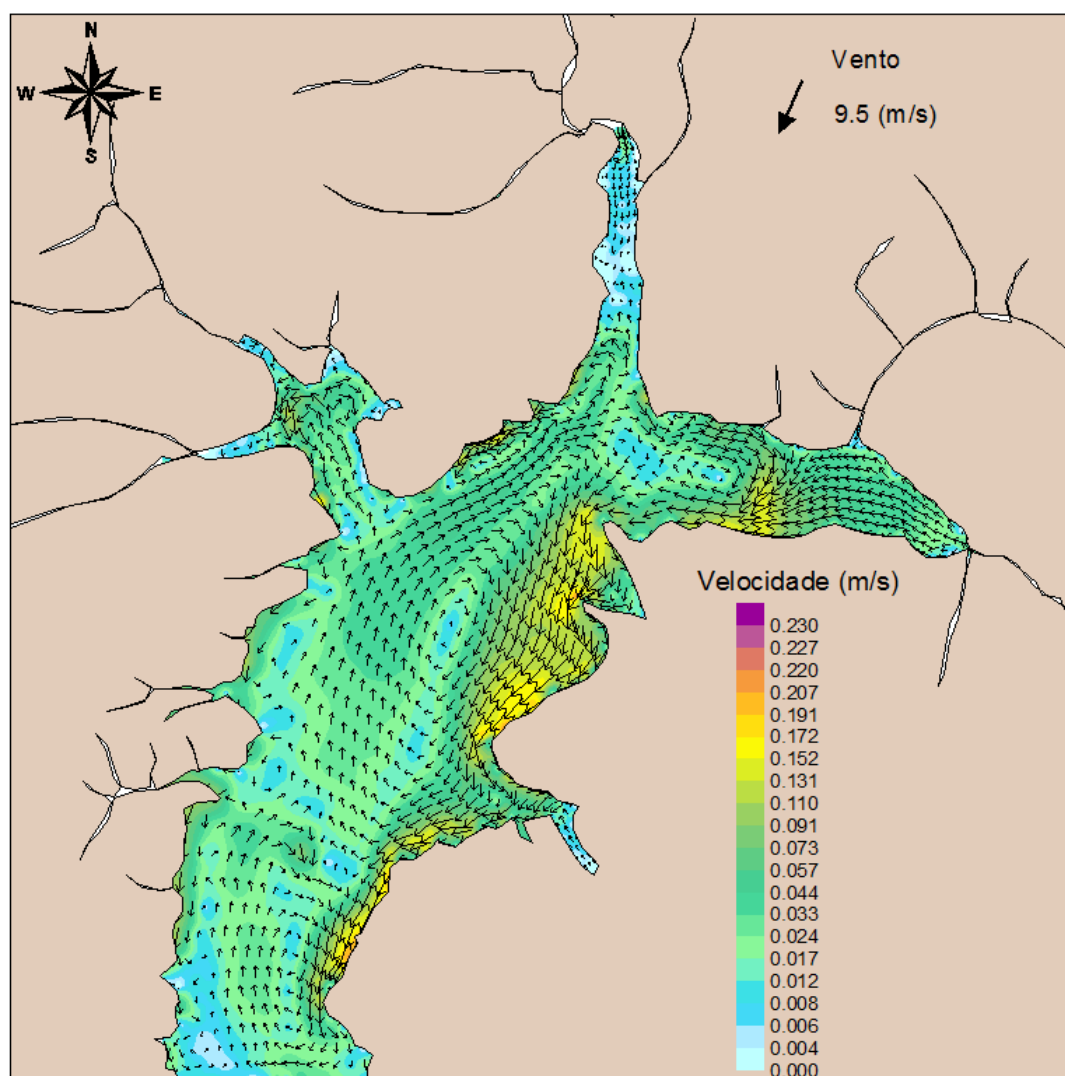


FIGURA 26 – CAMPO DE VELOCIDADES DETERMINADO ATRAVÉS DO MODELO HIDRODINÂMICO PARA UM INSTANTE COM VENTO FORTE DE NORDESTE

A Figura 27 mostra o campo de velocidades em um instante sem vento, ou seja, intensidade de vento nula. Como foram utilizadas vazões e, consequentemente, velocidades constantes como condição de contorno, é possível observar a grande influência do vento na circulação hidrodinâmica do reservatório. Este comportamento era esperado, considerando que o reservatório do Iraí é bastante raso e possui um alto tempo de residência. O valor máximo de velocidade encontrado no domínio da modelagem no instante com vento foi de $0,232 \text{ m.s}^{-1}$, enquanto que no instante sem vento este valor foi de apenas $0,0493 \text{ m.s}^{-1}$.

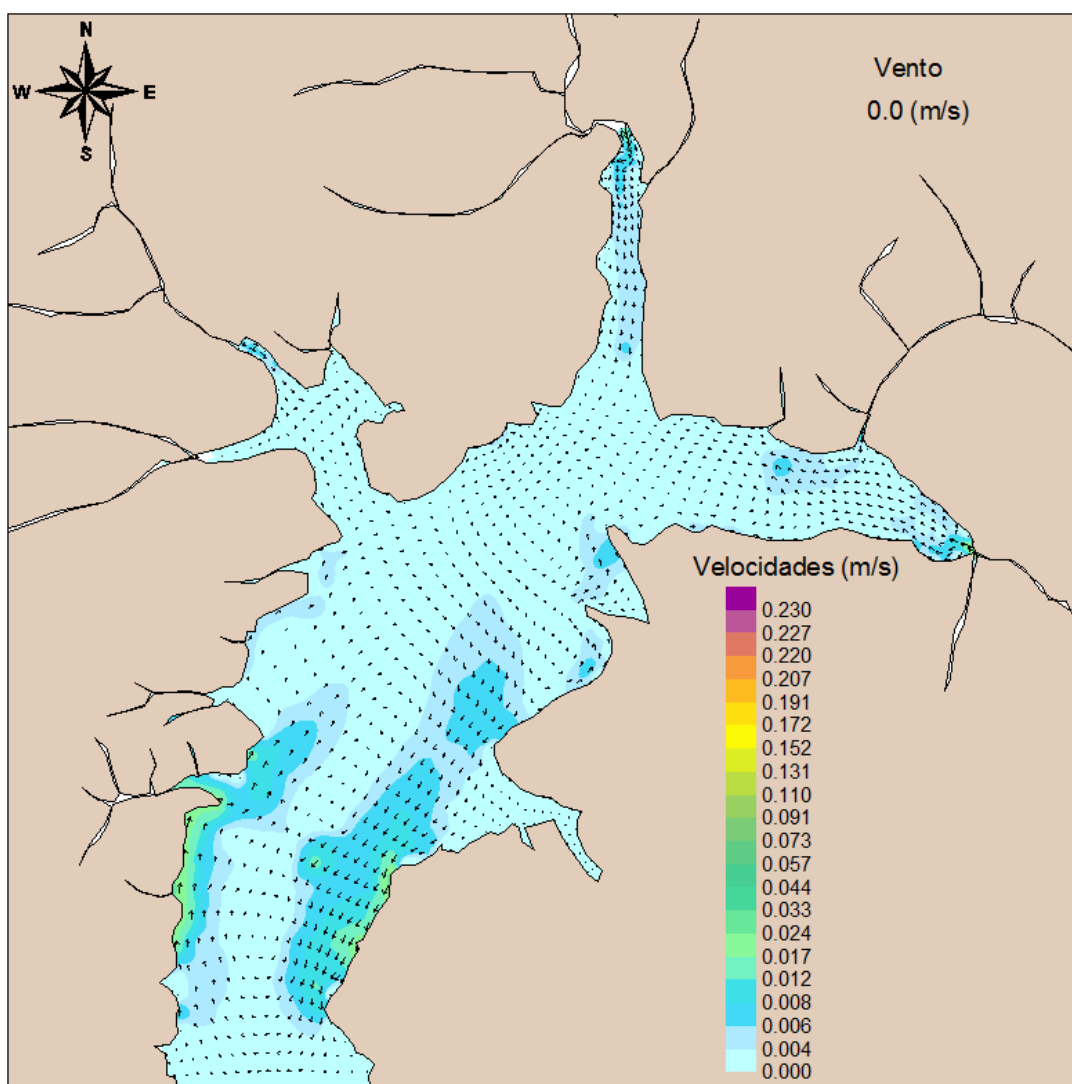


FIGURA 27 – CAMPO DE VELOCIDADES DETERMINADO ATRAVÉS DO MODELO HIDRODINÂMICO PARA UM INSTANTE SEM VENTO

Pode-se verificar que as maiores velocidades obtidas através do modelo hidrodinâmico se encontram nas partes mais rasas do reservatório, e que o escoamento retorna pelas partes mais profundas, gerando vórtices característicos de modelos integrados na vertical. Na circulação real, os vetores de velocidade na superfície estariam no sentido do vento, sendo obtidas velocidades maiores, e o escoamento retornaria pelas camadas mais profundas da coluna de água. Além disso, o efeito das diferenças de densidade entre a água do reservatório e a dos afluentes, que gera correntes descendentes quando os afluentes forem mais frios e ascendentes quando estes forem mais quentes, não é considerado pelo modelo.

Para calibrar e verificar os resultados do modelo hidrodinâmico, seriam necessários dados de velocidade da água, que não foram obtidos durante o projeto de estudo da eutrofização no reservatório do Iraí. Assim, os resultados da circulação hidrodinâmica foram utilizados de forma genérica como entrada para o modelo de qualidade da água, sendo necessários outros estudos para caracterização correta da hidrodinâmica no reservatório do Iraí.

5.3 SIMULAÇÃO DA TEMPERATURA DA ÁGUA

Os resultados de temperatura da água nos três pontos amostrais localizados no reservatório, obtidos através do SisBaHIA[®] durante os quatorze meses de simulação, são mostrados na Figura 28, na Figura 29 e na Figura 30. Para comparação com os resultados, podem ser observados os valores máximos e mínimos (identificados através de barras de erros) e a média dos dados medidos nos pontos amostrais. O erro relativo médio durante o período de simulação, calculado em relação à média entre os dados de temperatura na superfície e no fundo da coluna de água, foi de 0,0834 para o ponto RE1, de 0,0820 para o ponto RE2 e de 0,0712 para o ponto RE3. Foi considerado que o modelo representou de forma adequada a temperatura da água, seguindo a tendência observada ao longo das estações do ano. Desta forma, os valores dos parâmetros relativos ao transporte, como os coeficientes de dispersão turbulenta, foram confirmados como sendo adequados.

Os resultados no ponto RE1 apresentaram pequenas oscilações, provocadas pela utilização de dados horários de radiação solar, dando a curva um aspecto confuso e irregular. Estas oscilações foram menores nos pontos RE2 e RE3, que apresentam maiores profundidades, sucessivamente. Como o modelo é integrado na vertical, a variação horária de radiação causou respostas mais lentas nestes pontos, já que a quantidade de fluxo de calor necessária para alterar a temperatura da água foi maior.

Através das diferenças de temperatura da água entre a superfície e o fundo, visualizadas pelas barras de erros, pode-se observar que em algumas medições o reservatório estava estratificado termicamente, principalmente no ponto amostral com maior profundidade (RE3). Considerando que as medições foram realizadas durante o dia, e devido às características do reservatório do Iraí, citadas anteriormente, é possível supor que a queda noturna da temperatura do ar tenha promovido a circulação e a conseqüente mistura da coluna de água.



FIGURA 28 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1



FIGURA 29 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

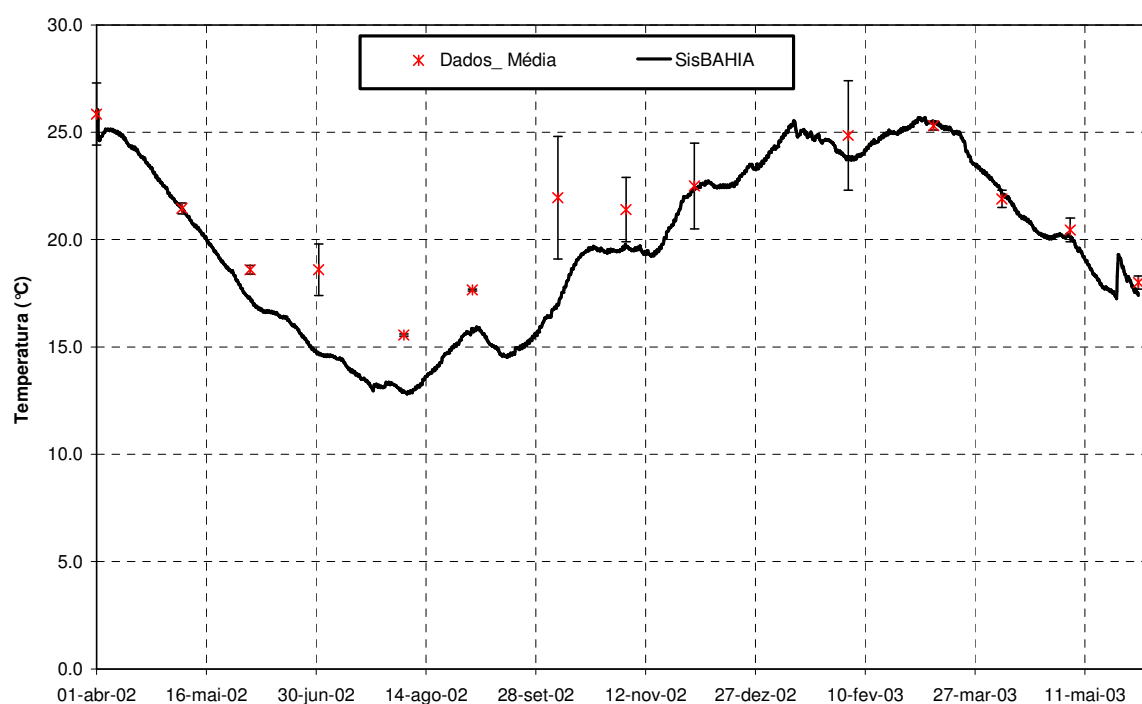


FIGURA 30 - VALORES DE TEMPERATURA DA ÁGUA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

As distribuições espaciais da temperatura da água determinadas pelo MQA do SisBaHIA®, para um instante no inverno e outro no verão, são mostradas na Figura 31 e na Figura 32, respectivamente. Pode-se observar a grande influência da estação climática para a determinação da temperatura da água. No inverno, houve uma maior homogeneidade dos resultados em todo o reservatório, com maiores gradientes próximos aos rios. No verão, maiores gradientes horizontais foram observados, com temperaturas mais elevadas nas regiões mais rasas e pouca influência das condições de contorno.

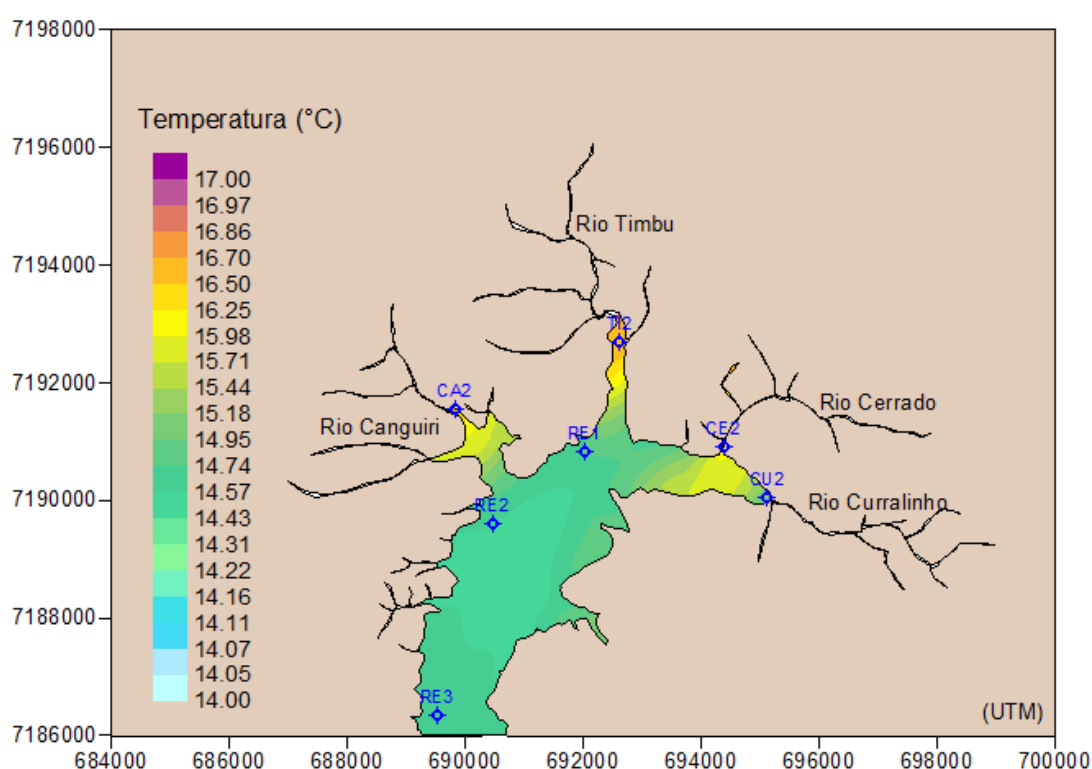


FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA DA ÁGUA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

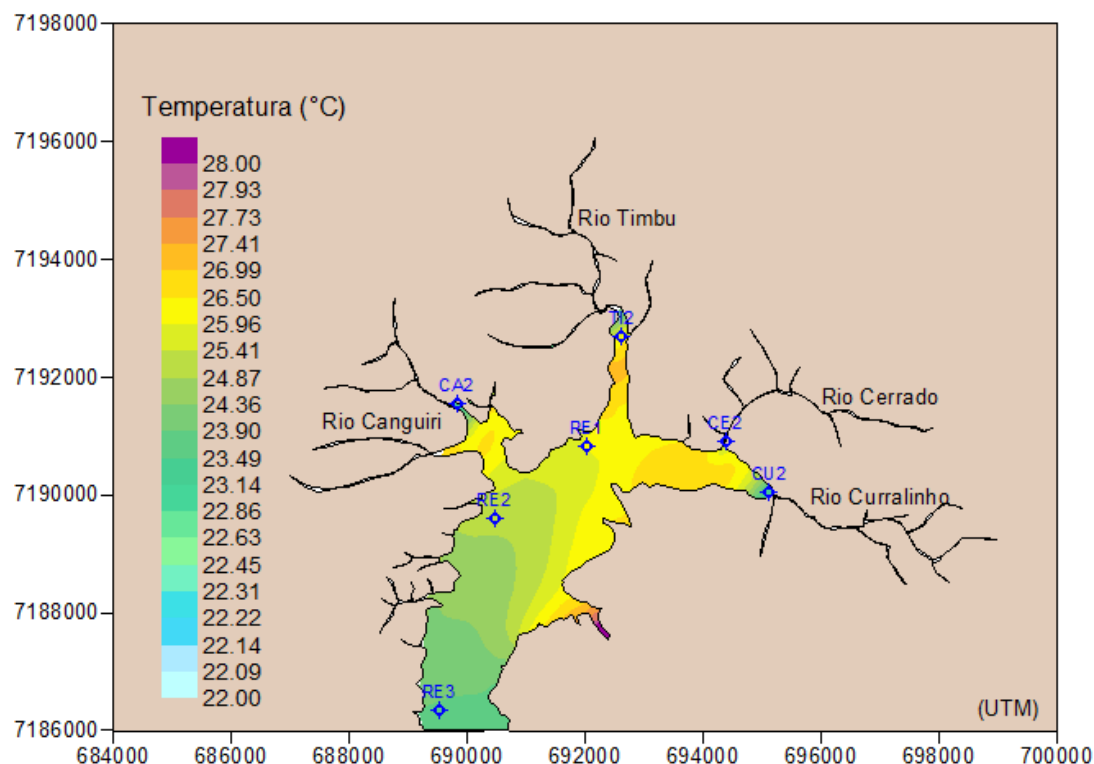


FIGURA 32 – DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA DA ÁGUA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

5.4 CALIBRAÇÃO DO MQA

Os valores dos parâmetros do MQA, encontrados durante o processo de calibração, são mostrados no Quadro 15. Estes valores se encontram dentro da faixa obtida na literatura, mostrada no Apêndice, e foram utilizados para simular os novos cenários com o MQA.

PARÂMETRO	SEM ZOOPLÂNCTON	COM ZOOPLÂNCTON	UNIDADES
$k_g(20)$	3.6	3.6	d^{-1}
θ_g	1.01	1.01	-
k_{Sn}	25	25	$\mu gN L^{-1}$
k_{Sp}	20	20	$\mu gP L^{-1}$
I_s	150	150	$W m^{-2}$
k_{sa}	-	10	$(\mu gChla L^{-1})$
θ_{gz}	-	1.08	-
$k_{gz}(20)$	-	2	$m^3 gC^{-1} d^{-1}$
$k_{ra}(20)$	0.3	0.2	d^{-1}
θ_{ra}	1.08	1.08	-
$k_{rz}(20)$	-	0.1	d^{-1}
θ_{rz}	-	1.08	-
E_z	-	0.7	-
θ_{gzc}	-	1.08	-
$k_{gzc}(20)$	-	0.075	d^{-1}
f_{on}	0.5	0.5	-
k_{am}	50	50	$\mu gN L^{-1}$
r_{oc}	2.67	2.67	$gO.gC^{-1}$
r_{ca}	10	10	$gC gChla^{-1}$
θ_{12}	1.08	1.08	-
θ_{2D}	1.045	1.045	-
θ_{71}	1.08	1.08	-
θ_{83}	1.08	1.08	-
θ_a	1.008	1.008	-
θ_D	1.02	1.02	-
θ_s	1.08	1.08	-
f_{D5}	0.95	0.95	-
f_{D7}	0.95	0.95	-
f_{D8}	0.9	0.9	-
f_{op}	0.5	0.5	-
$k_{12}(20)$	0.3	0.3	d^{-1}
$k_{2D}(20)$	0.082	0.082	d^{-1}
$k_{71}(20)$	0.035	0.035	d^{-1}

PARÂMETRO	SEM ZOOPLÂNCTON	COM ZOOPLÂNCTON	UNIDADES
$k_{83}(20)$	0.05	0.05	d^{-1}
$k_a(20)$	0.2	0.2	d^{-1}
$k_D(20)$	0.05	0.05	d^{-1}
k_{DBO}	0.5	0.5	$mgO_2 L^{-1}$
k_{NIT}	1.0	1.0	$mgO_2 L^{-1}$
k_{ea}	0.1	0.1	d^{-1}
k_{ez}	-	0.05	d^{-1}
$SOD(20)$	0.6	0.6	$gO_2 m^{-2} d^{-1}$
v_{s3}	0.2	0.2	$m d^{-1}$
v_{s4}	0.05	0.05	$m d^{-1}$
v_{fr}	0.4	0.4	$m d^{-1}$
r_{na}	6.0	6.0	$mgN mgChla^{-1}$
r_{pa}	1.0	1.0	$mgP mgChla^{-1}$

QUADRO 15 - VALORES DOS PARÂMETROS ENCONTRADOS NA CALIBRAÇÃO DO MQA

5.4.1 Calibração sem Zooplâncton Herbívoro

A seguir são apresentados os resultados da calibração sem a consideração da variável zooplâncton herbívoro. A Tabela 3 mostra o erro relativo médio calculado na comparação entre os resultados do MQA e os dados das variáveis nos pontos de amostragem. Por simplicidade, na apresentação dos resultados foi considerado que os dados de clorofila *a* obtidos nos pontos amostrais 508, 504 e 507, mostrados na Figura 9, são similares às concentrações nos pontos RE1, RE2 e RE3. Também são mostrados os resultados de clorofila *a* no ponto amostral 502, localizado próximo ao vertedouro do reservatório. Como a calibração foi realizada através de tentativa e erro, os erros relativos médios mostrados na Tabela 3 não podem ser considerados como os menores possíveis, representando apenas os erros obtidos nesta calibração.

TABELA 3 - ERROS RELATIVOS MÉDIOS NA CALIBRAÇÃO SEM ZOOPLÂNCTON

Variável/ Ponto	a	L	PO	P	NA	NO	NI	OD
RE1	0,58	0,37	1,88	0,62	1,91	0,38	0,93	0,17
RE2	0,52	0,38	0,58	0,77	2,65	0,35	0,64	0,14
RE3	0,97	0,36	0,45	0,55	3,41	0,46	0,57	0,38
502	0,42	-	-	-	-	-	-	-

Da Figura 33 à Figura 36 são mostradas comparações entre os resultados do MQA e os dados de clorofila *a* nos pontos amostrais RE1, RE2, RE3 e no ponto amostral 502. As amostras usadas para análise de clorofila *a* foram coletadas apenas próximas à superfície nos pontos RE1, RE2 e RE3, sendo que o MQA do SisBaHIA® apresenta resultados médios na coluna de água. Assim, a comparação entre os resultados do modelo e os dados medidos nestes pontos poderá, em alguns casos, não ser adequada, principalmente no ponto mais profundo (RE3), já que a distribuição vertical do fitoplâncton não é homogênea.

Como no ponto amostral 502 foram realizadas medições em três profundidades, é possível observar na Figura 36, através das barras de erros com o desvio padrão, as diferenças de concentração de clorofila *a* ao longo da coluna de água. Neste ponto e nos pontos mais rasos (RE1 e RE2), foram verificadas melhores correspondências entre os resultados e os dados. O menor erro relativo médio foi obtido no ponto amostral 502.

Pode-se notar nas figuras que as curvas apresentaram um aspecto confuso e irregular, devido às oscilações de pequena amplitude encontradas nos resultados obtidos pelo SisBaHIA®. Como a radiação solar influi diretamente no crescimento de fitoplâncton, é possível que estas oscilações tenham sido causadas pela utilização de dados horários das variáveis meteorológicas, assim como visto para a temperatura da água. Além disso, oscilações na temperatura da água influenciam diretamente em vários processos associados ao fitoplâncton, alterando os valores da taxa de crescimento, da taxa de perdas devido à respiração e excreção, e da taxa de mortalidade não predatória.

Os efeitos da variação horária das variáveis meteorológicas também causaram oscilações nas outras variáveis do modelo, já que a temperatura da água influi diretamente na maioria dos processos representados. Entretanto, as variáveis que possuem uma alta interdependência com a variável clorofila *a*, como os nutrientes inorgânicos, apresentaram resultados com maiores oscilações. Estas

oscilações representam a resposta do modelo aos dados de entrada, possuindo pouca relação com oscilações numéricas.

Distribuições espaciais da concentração de clorofila a simulada pelo MQA são mostradas na Figura 37 e Figura 38. É possível observar as diferenças na distribuição horizontal, com valores mais elevados próximos à entrada dos rios Timbu e Canguiri, principais contribuintes de nutrientes ao reservatório. Além disso, nas regiões mais rasas a temperatura da água é mais elevada, resultando numa maior taxa de crescimento do fitoplâncton.

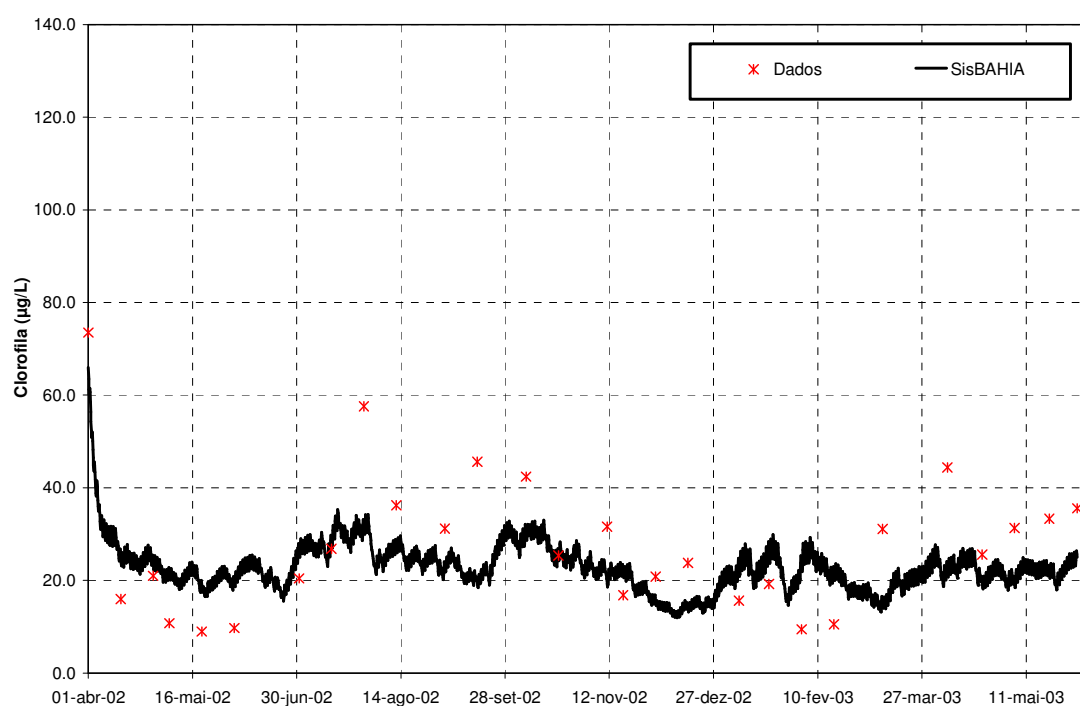


FIGURA 33 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

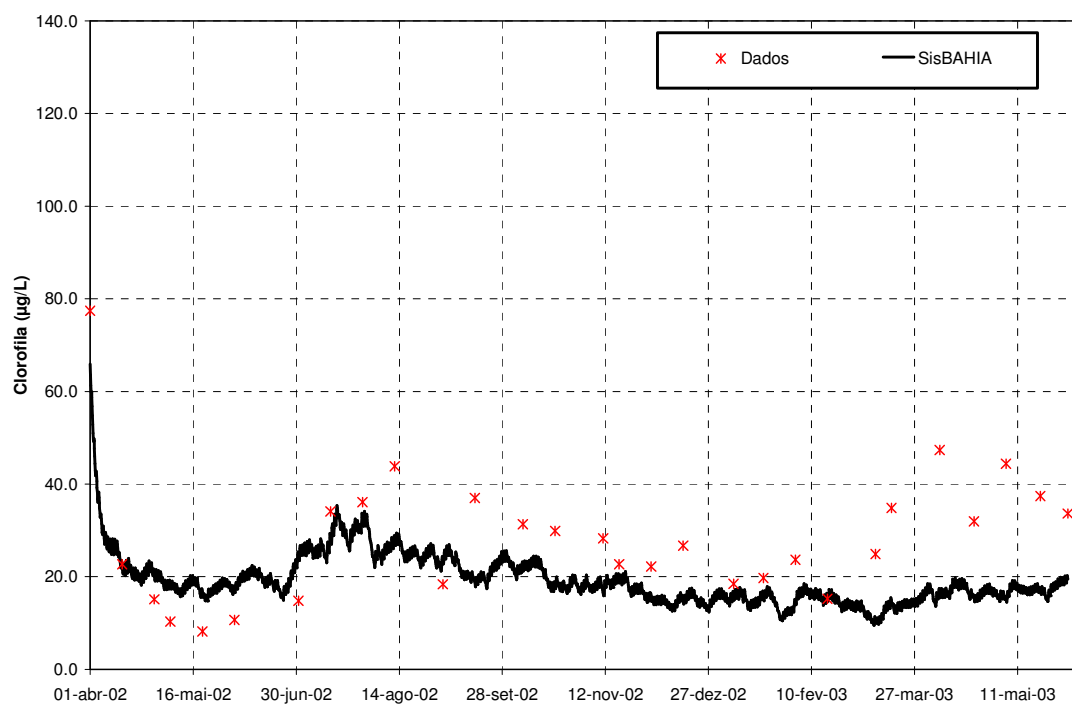


FIGURA 34 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

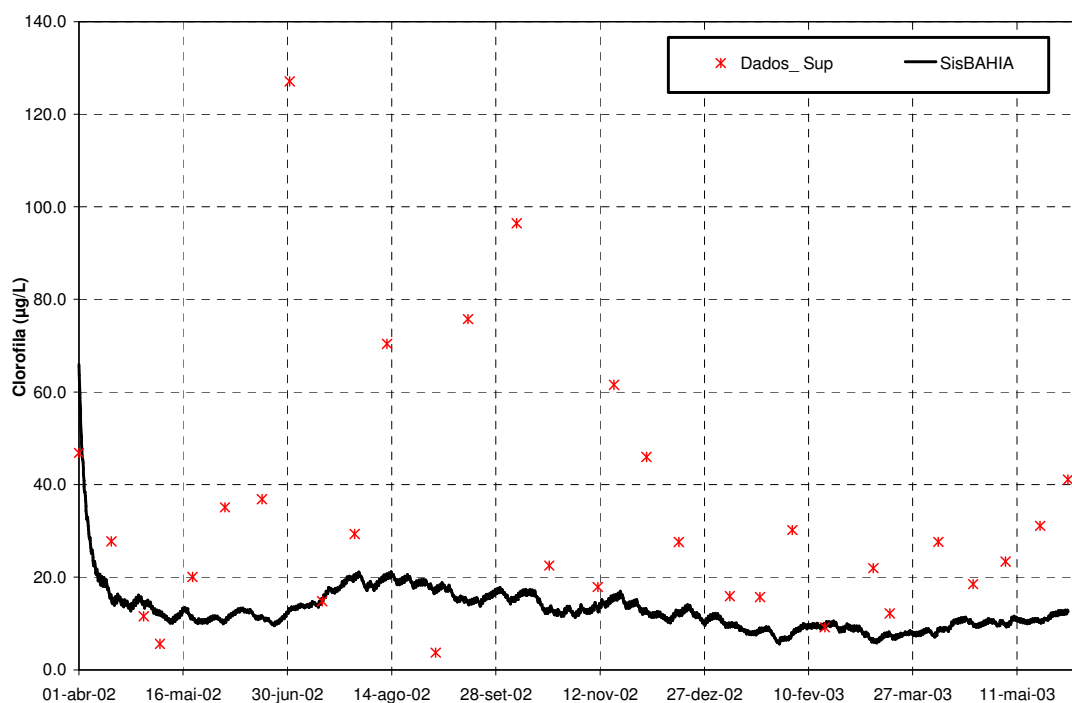


FIGURA 35 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

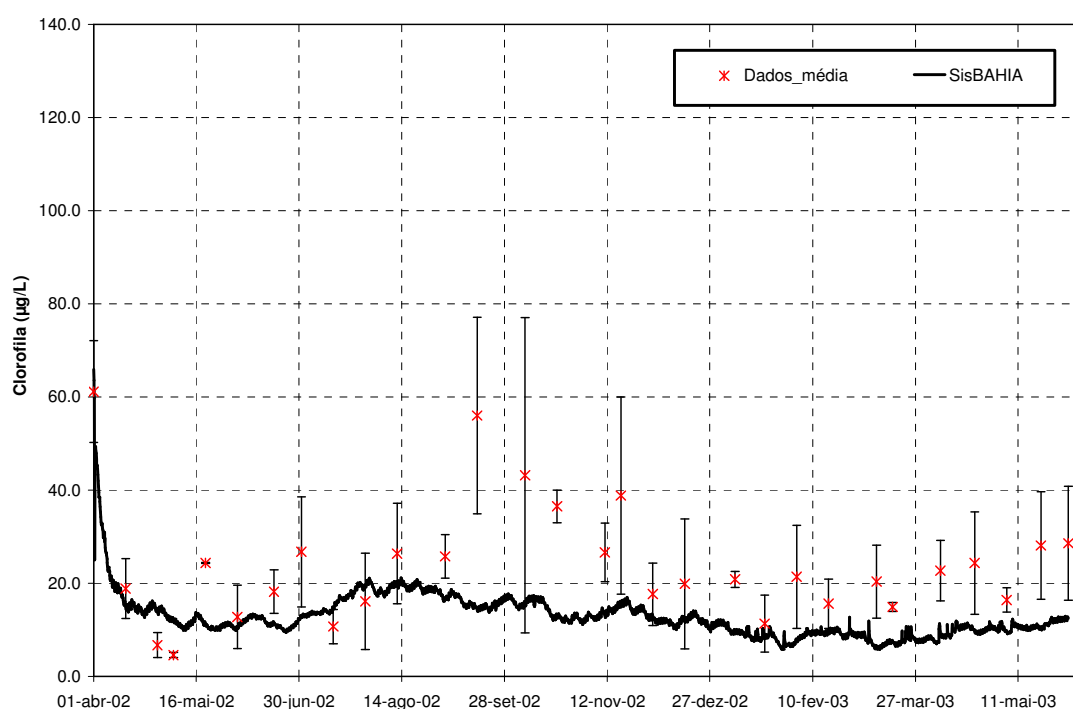


FIGURA 36 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO 502

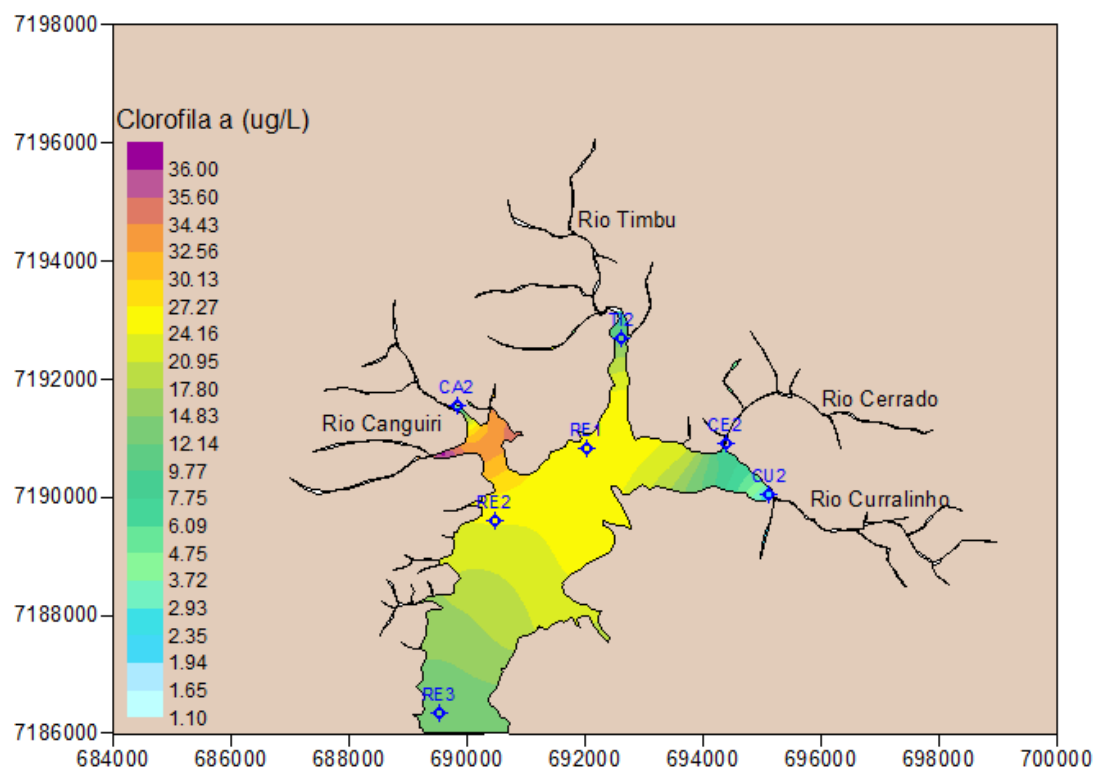


FIGURA 37 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

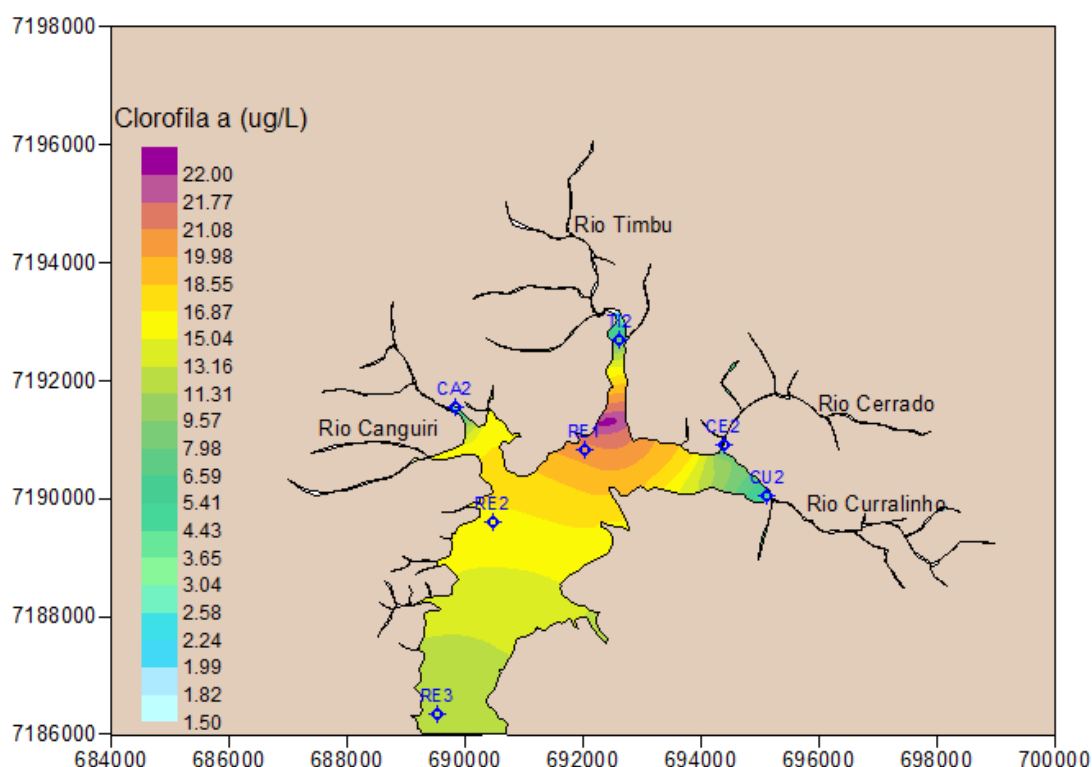


FIGURA 38 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

A Figura 39, a Figura 40 e a Figura 41 mostram comparações entre os resultados do MQA e os dados de concentração de fosfato reativo nos pontos amostrais RE1, RE2, RE3. O ponto RE1 se encontra mais a montante da barragem, sofrendo influência direta do rio Timbu, e o ponto RE2, localizado em uma posição intermediária no reservatório, sofre influência direta do rio Canguiri. Isto pode ser verificado nas distribuições espaciais da concentração de fosfato reativo mostradas na Figura 42 e Figura 43. Os resultados do ponto RE3 apresentaram o menor erro relativo médio. A Figura 44, a Figura 45 e a Figura 46 mostram os resultados encontrados para a concentração de fosfato orgânico. Novamente o menor erro relativo médio foi obtido no ponto RE3. As distribuições espaciais da concentração de fosfato orgânico obtidas pelo SisBaHIA® são mostradas na Figura 47 e a Figura 48.

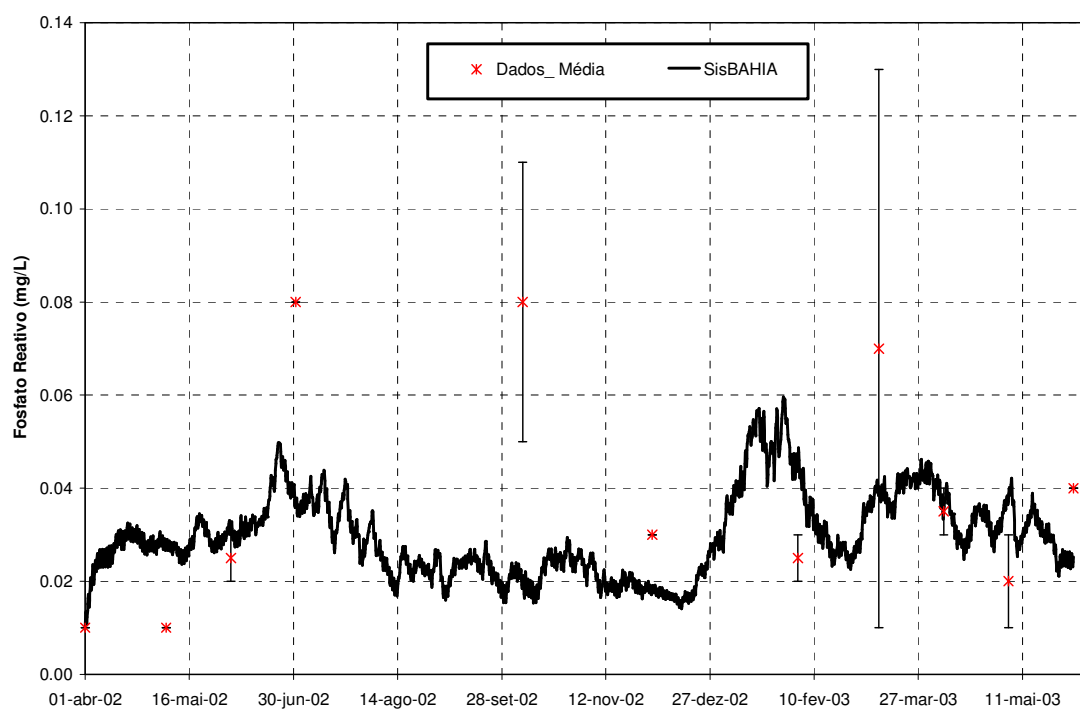


FIGURA 39 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1



FIGURA 40 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

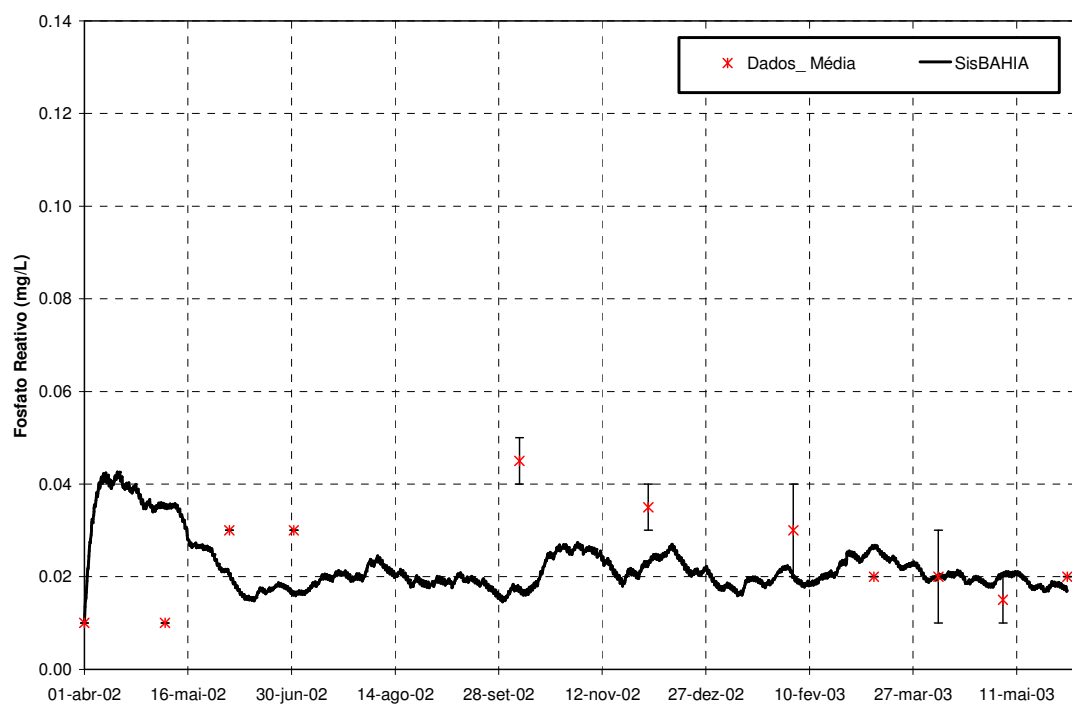


FIGURA 41 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS PONTO RE3

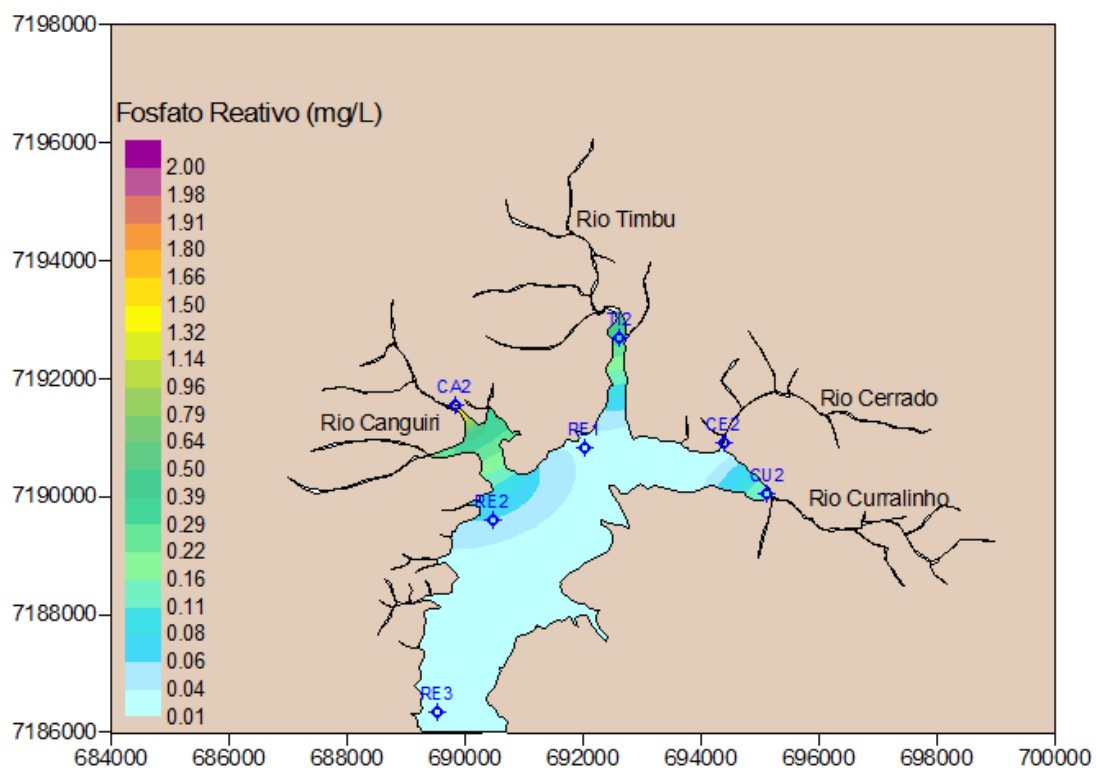


FIGURA 42 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

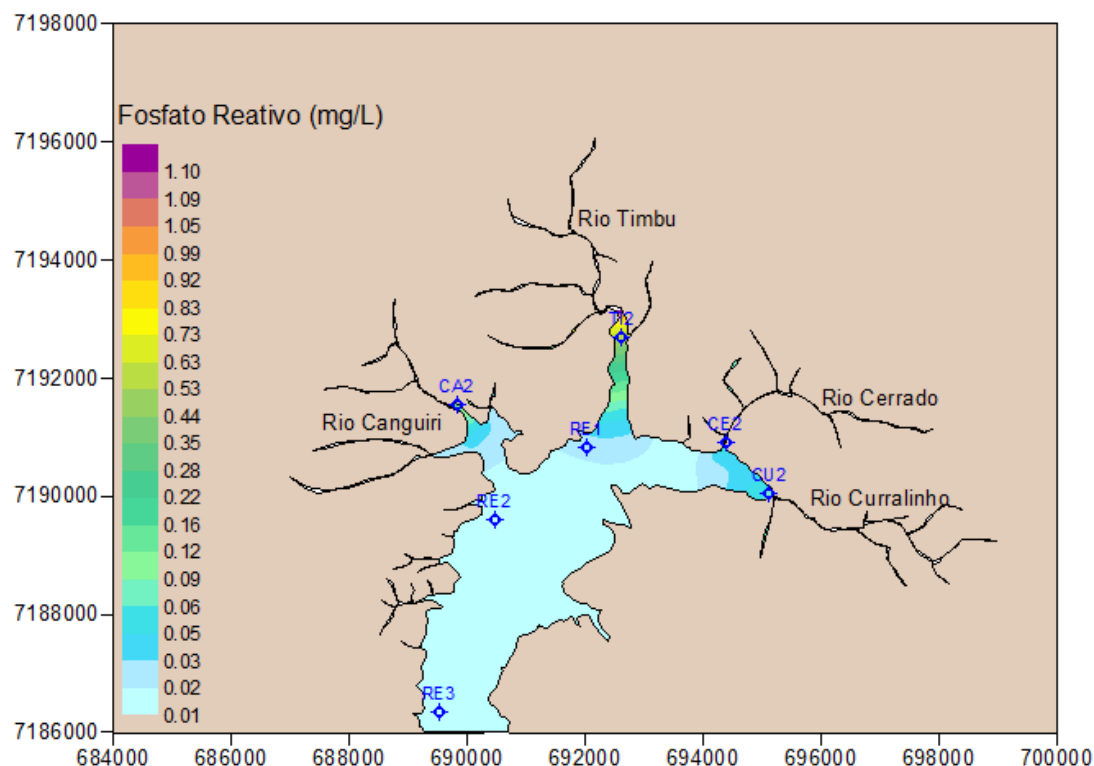


FIGURA 43 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

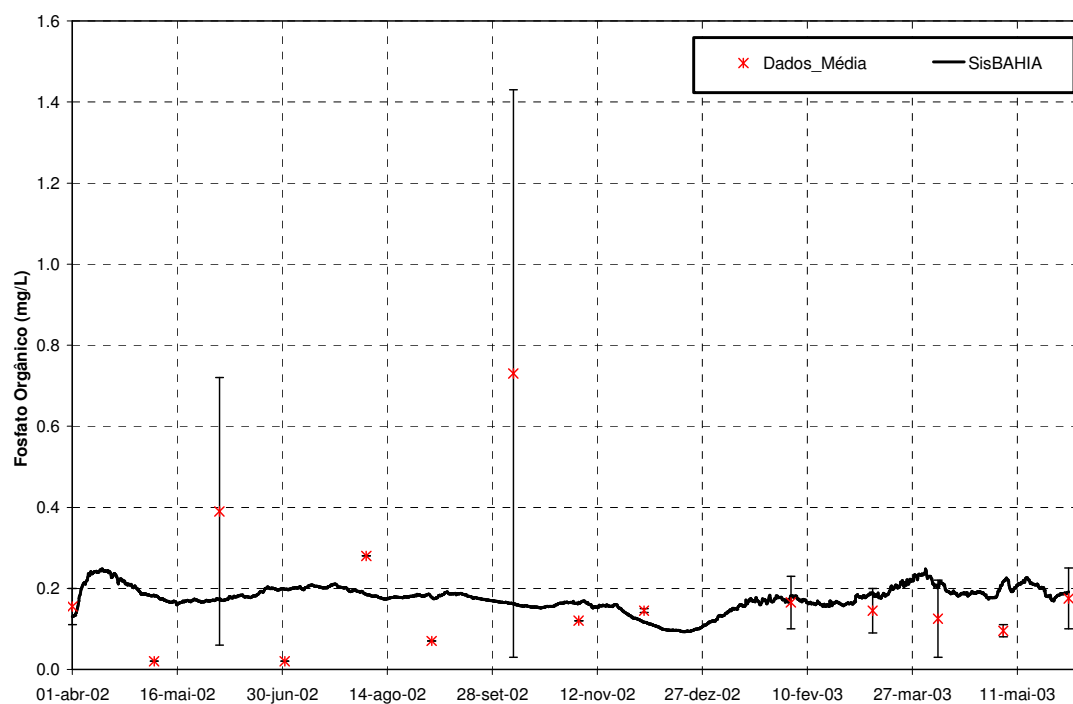


FIGURA 44 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

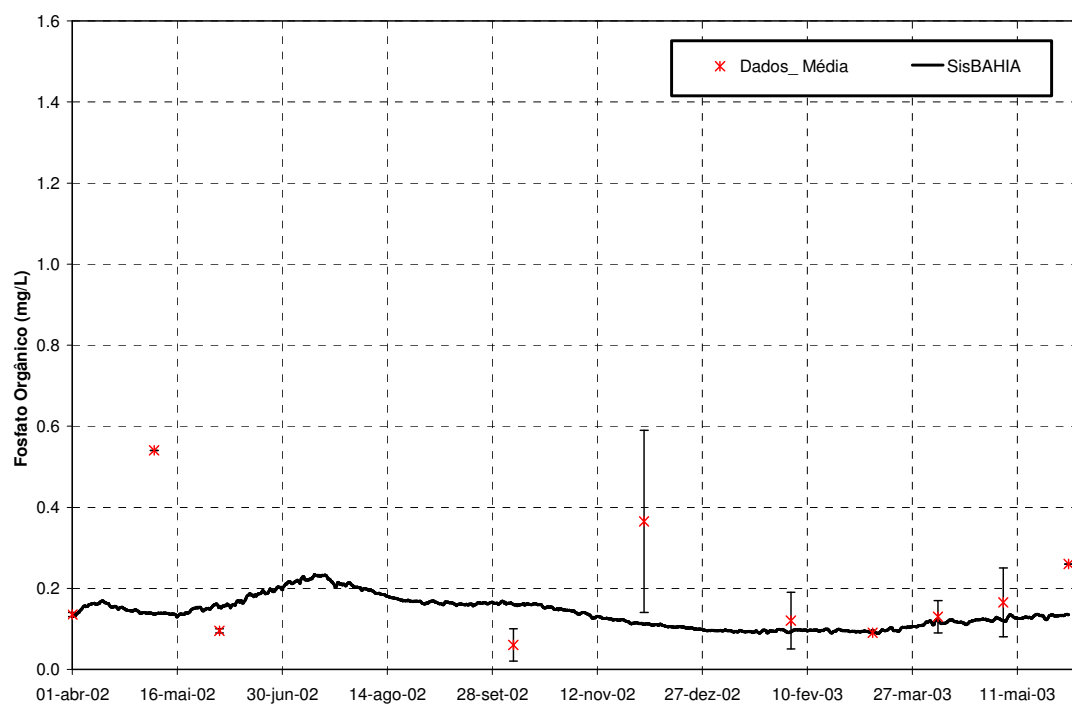


FIGURA 45 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

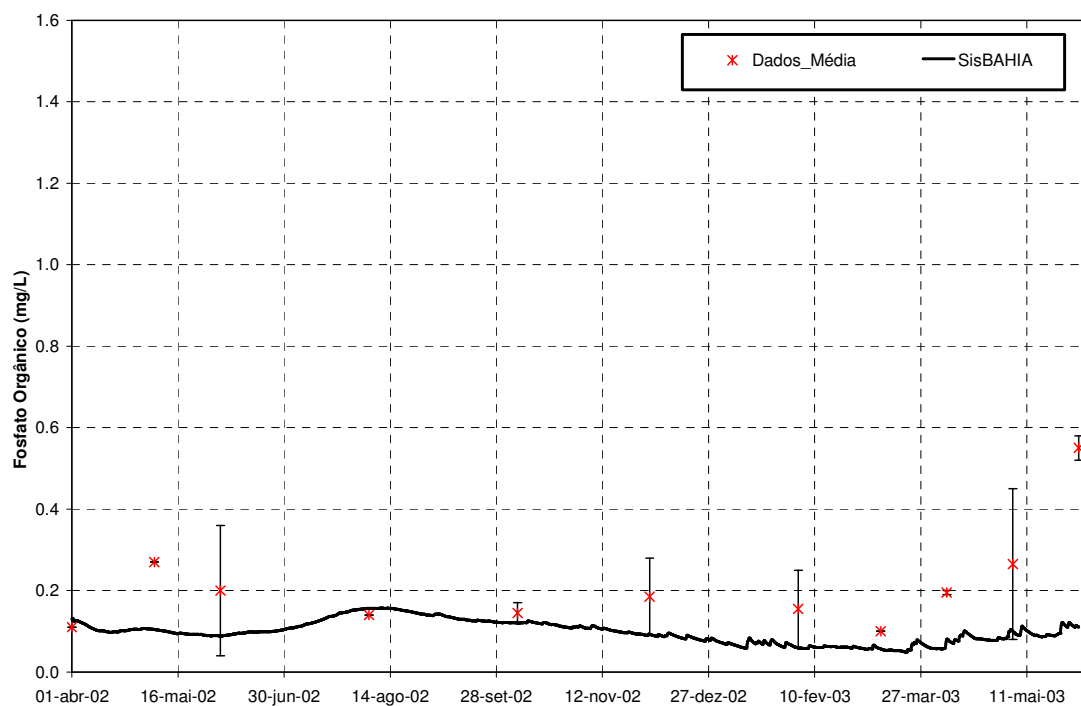


FIGURA 46 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

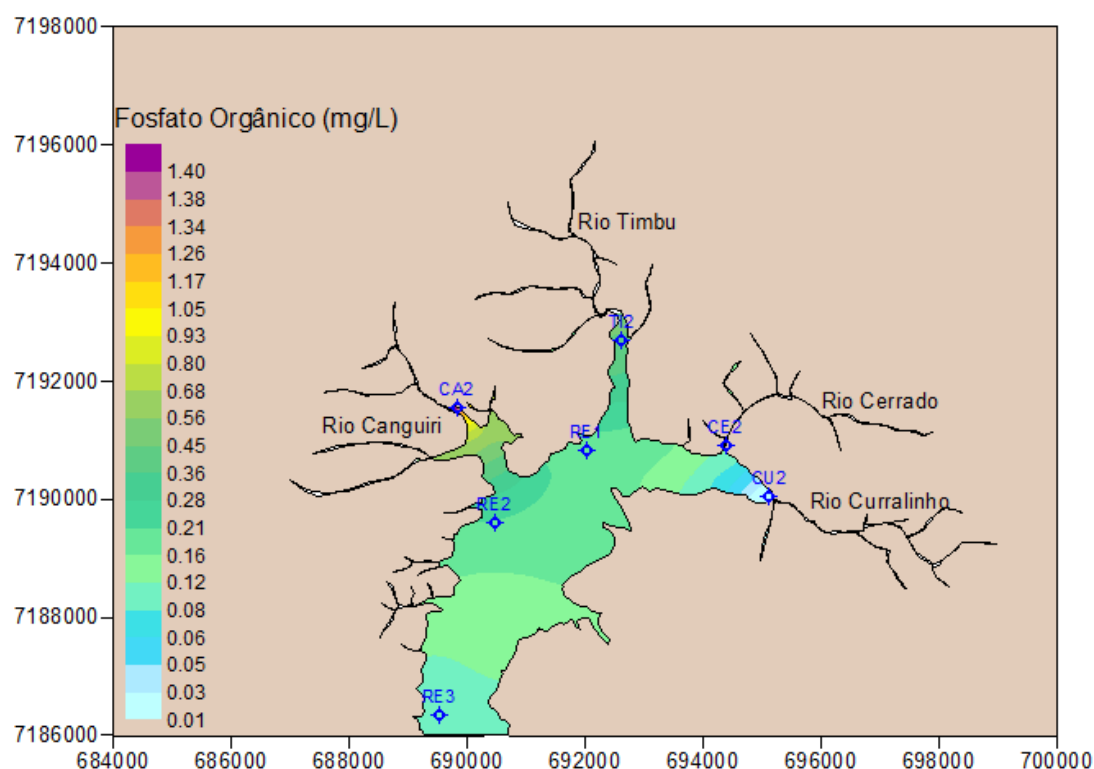


FIGURA 47 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

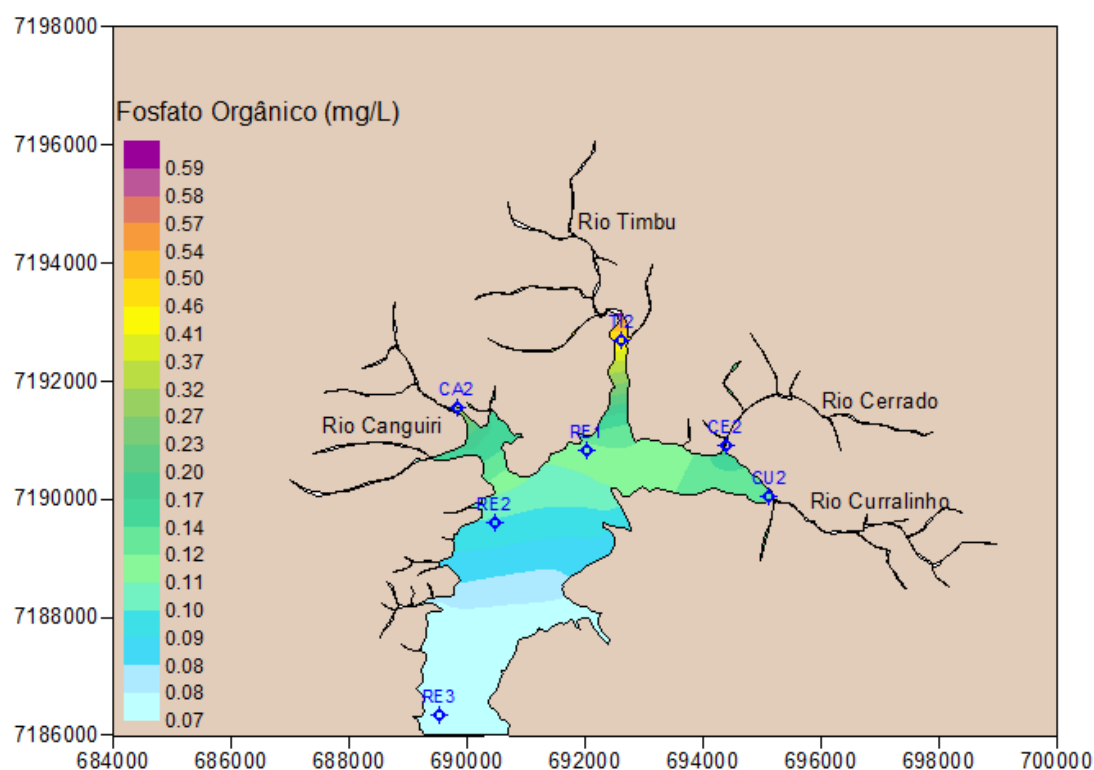


FIGURA 48 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

Os resultados obtidos pelo SisBaHIA[®] para a variável nitrato são mostrados na Figura 49, Figura 50 e Figura 51. Pode-se notar que erros significativos foram causados pela imposição da condição inicial, definida a partir da média das concentrações de nitrato, medidas nos pontos RE1, RE2 e RE3 no dia correspondente ao início da simulação. Assim, com a definição pontual da condição inicial em cada nó da malha de elementos finitos, observando-se a concentração de nitrato medida em cada ponto amostral, melhores resultados poderão ser encontrados para esta variável na calibração do MQA. Na Figura 52 e Figura 53 são mostradas distribuições espaciais da concentração de nitrato obtidas através do SisBaHIA[®]. Pode-se observar o forte gradiente horizontal gerado, com a diminuição da concentração de nitrato ao longo do reservatório.

Os resultados da variável amônia são mostrados na Figura 54, Figura 55 e Figura 56, sendo suas distribuições espaciais mostradas na Figura 57 e Figura 58. Pode-se verificar a influência direta das condições de contorno nas concentrações dos pontos RE1 e RE2. O ponto RE3, por estar na zona lântica do reservatório, não apresenta resposta direta às alterações nas condições de contorno, possuindo grande influência dos processos de transformação considerados no modelo. A amônia foi a variável do modelo que apresentou maiores erros relativos médios. Coincidentemente, a amônia apresenta a menor quantidade de dados entre as variáveis para comparação com os resultados do modelo.

Na Figura 59, na Figura 60 e na Figura 61 são mostrados os resultados de nitrogênio orgânico. Entre as formas de nitrogênio representadas pelo MQA, o nitrogênio orgânico foi a que apresentou os menores erros. As distribuições espaciais da concentração de nitrogênio orgânico são apresentadas na Figura 62 e Figura 63, mostrando uma maior homogeneidade entre os resultados encontrados nos pontos RE1, RE2 e RE3.



FIGURA 49 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

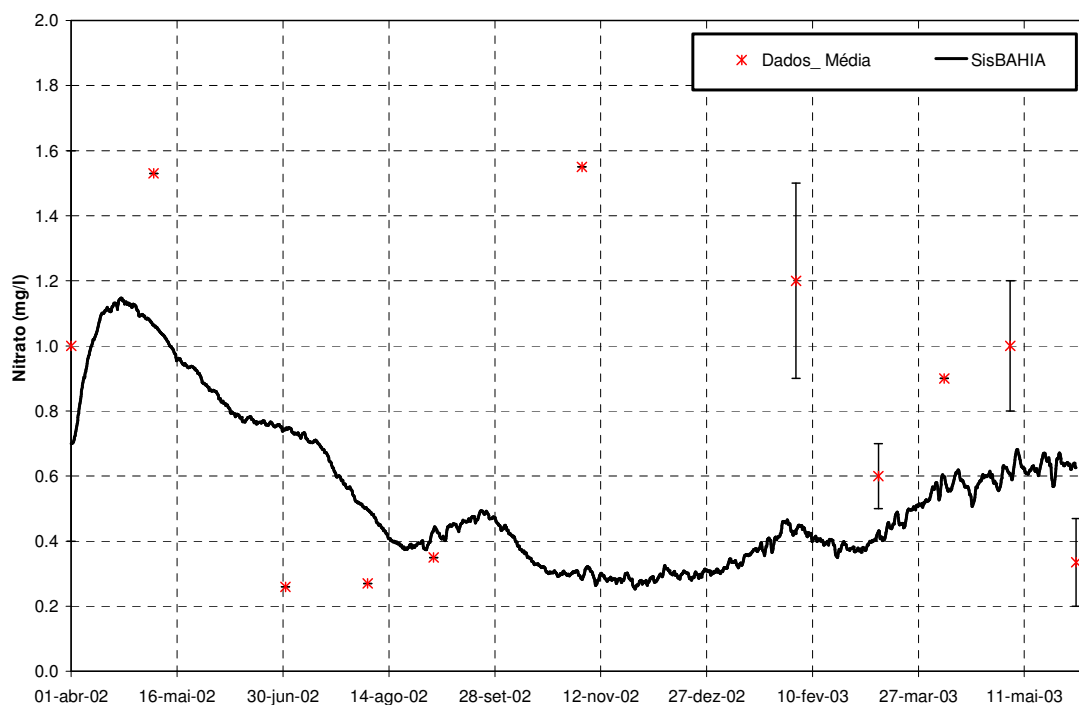


FIGURA 50 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

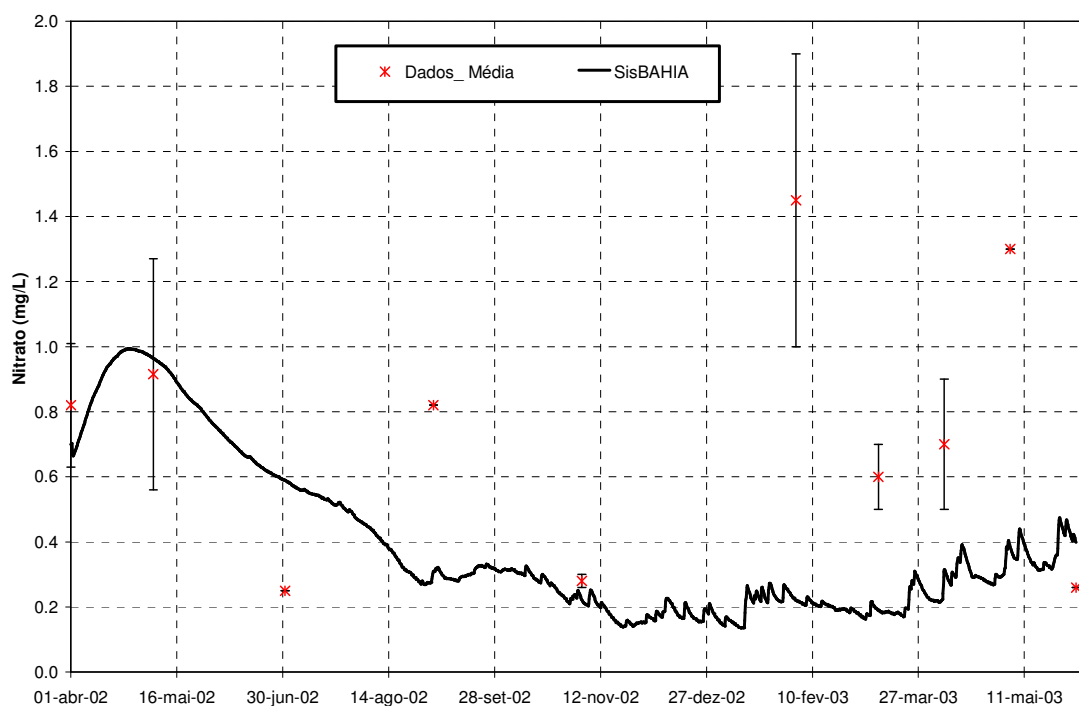


FIGURA 51 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

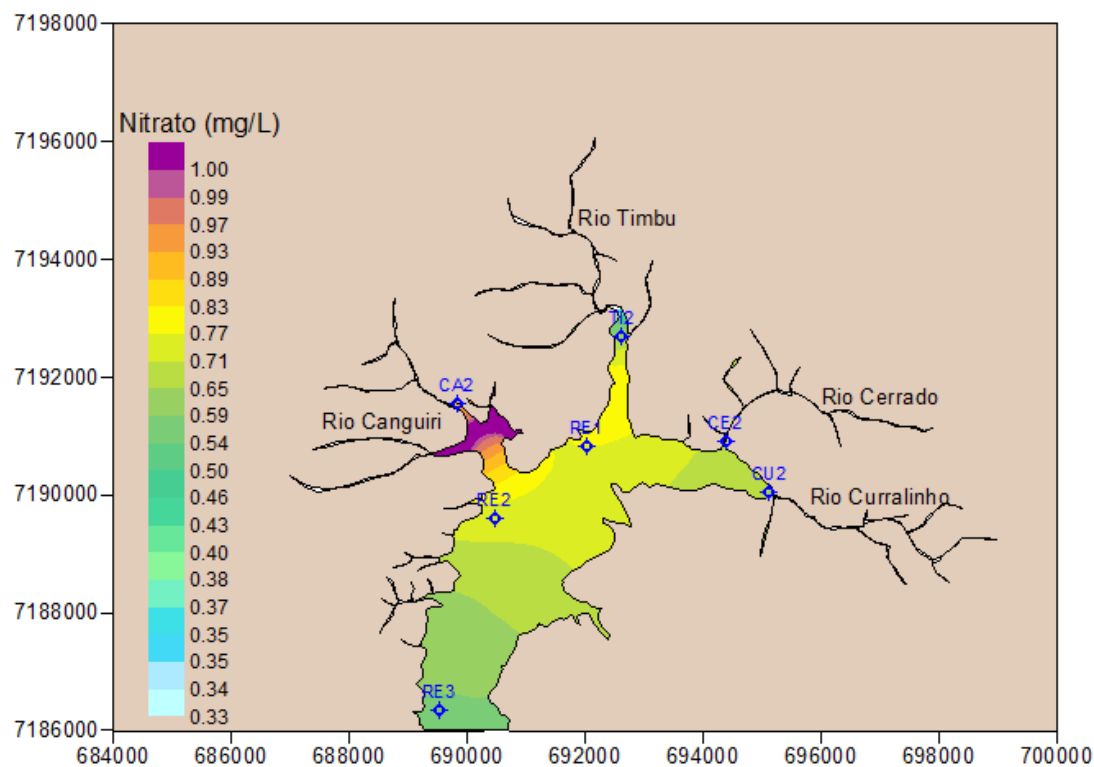


FIGURA 52 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITRATO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

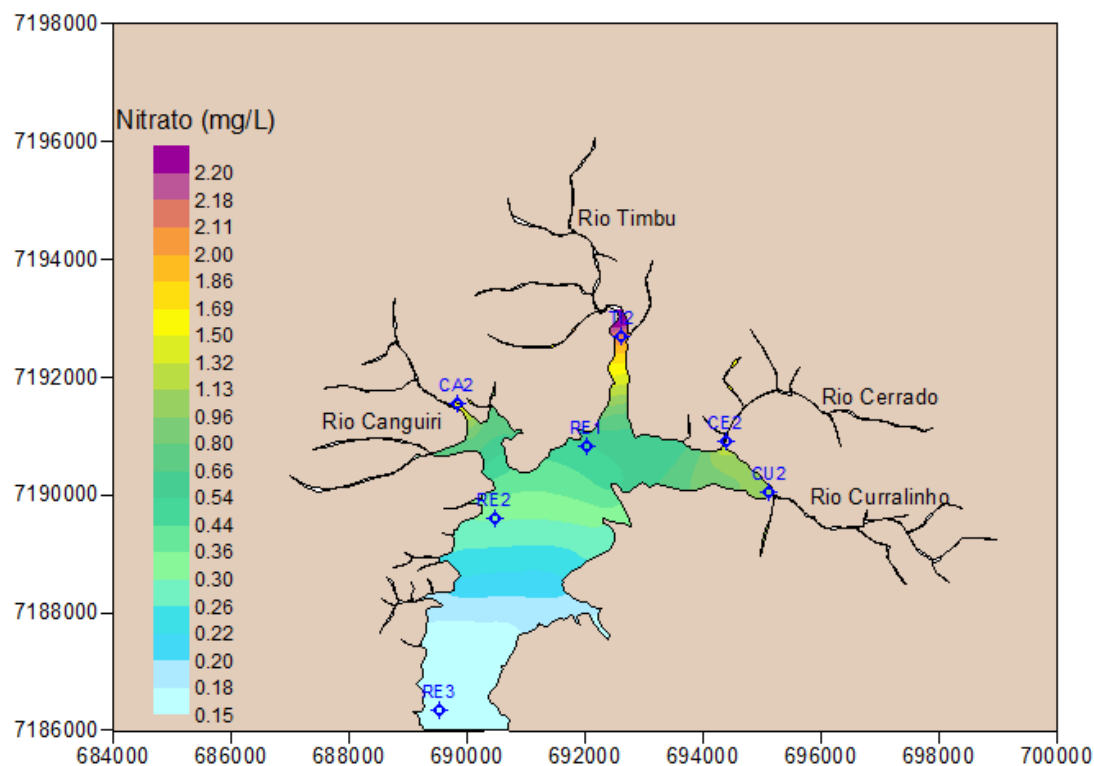


FIGURA 53 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITRATO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03



FIGURA 54 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1



FIGURA 55 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA[®] E MEDIDOS NO PONTO RE2

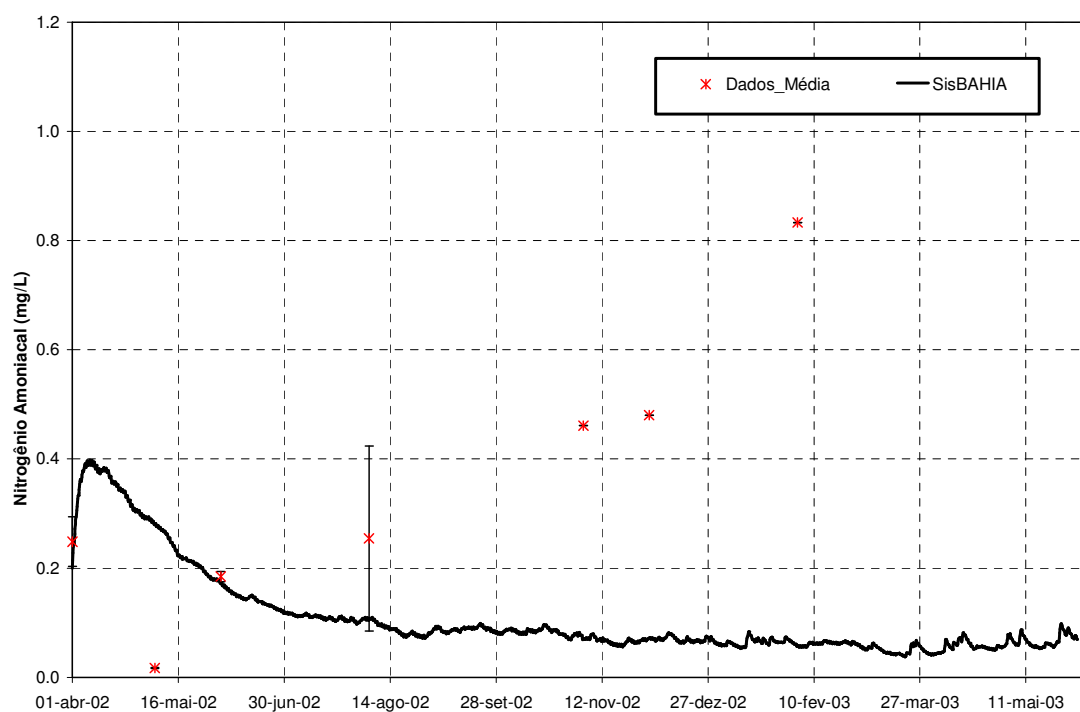


FIGURA 56 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA[®] E MEDIDOS NO PONTO RE3

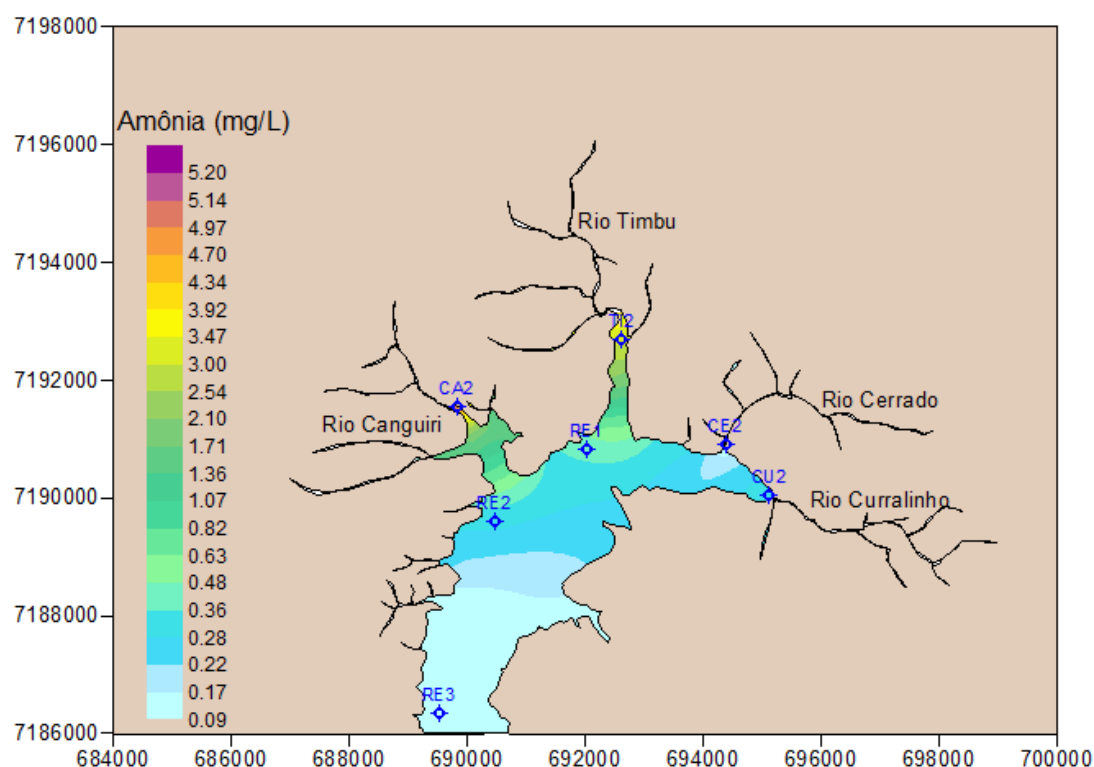


FIGURA 57 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

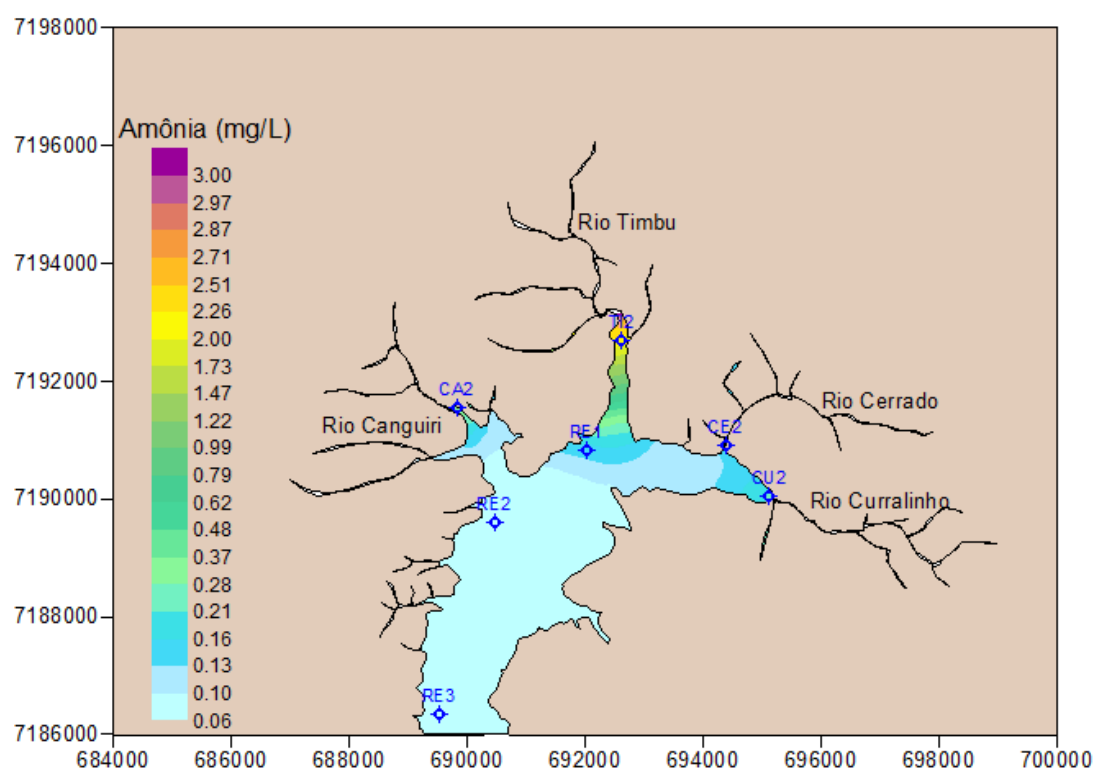


FIGURA 58 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

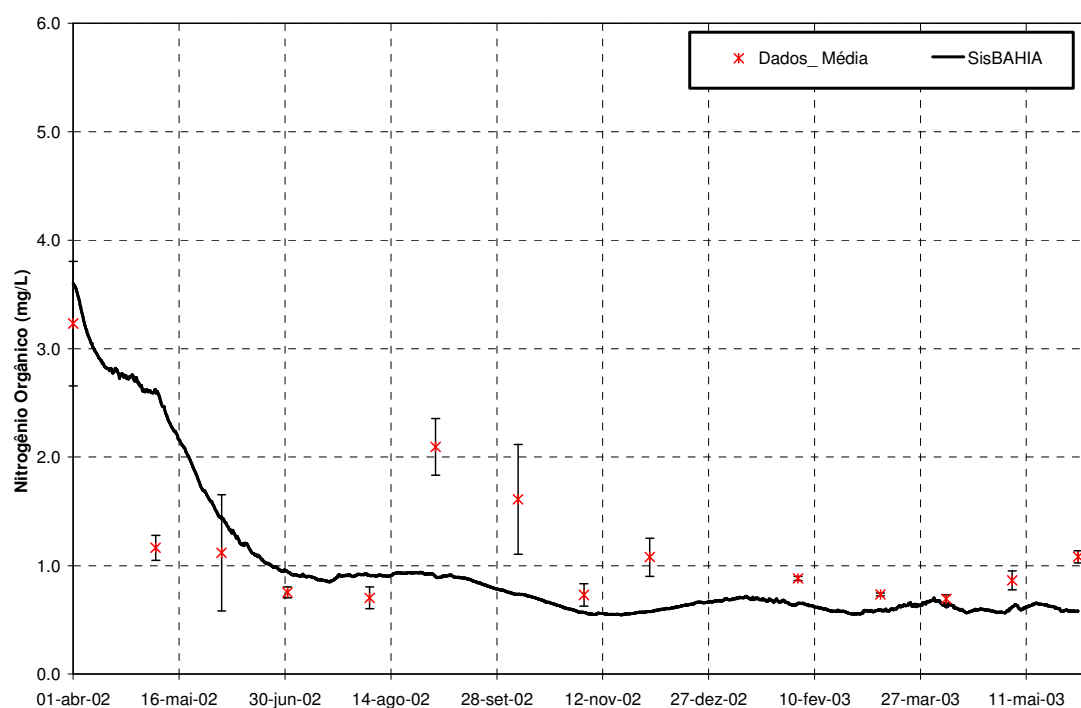


FIGURA 59 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

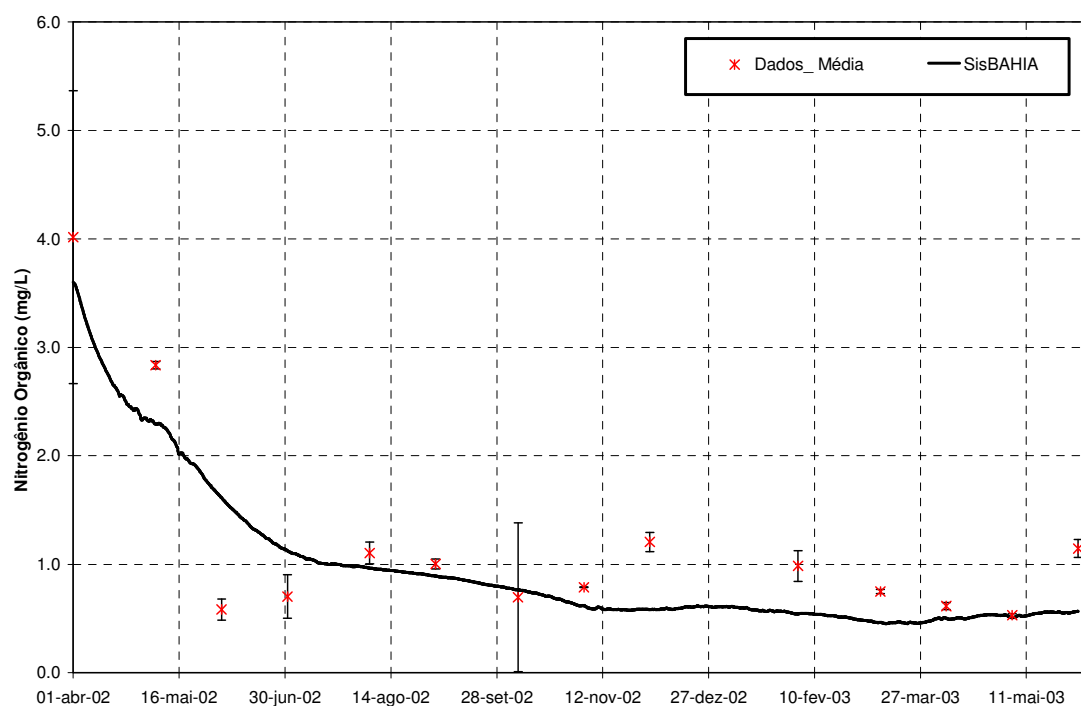


FIGURA 60 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

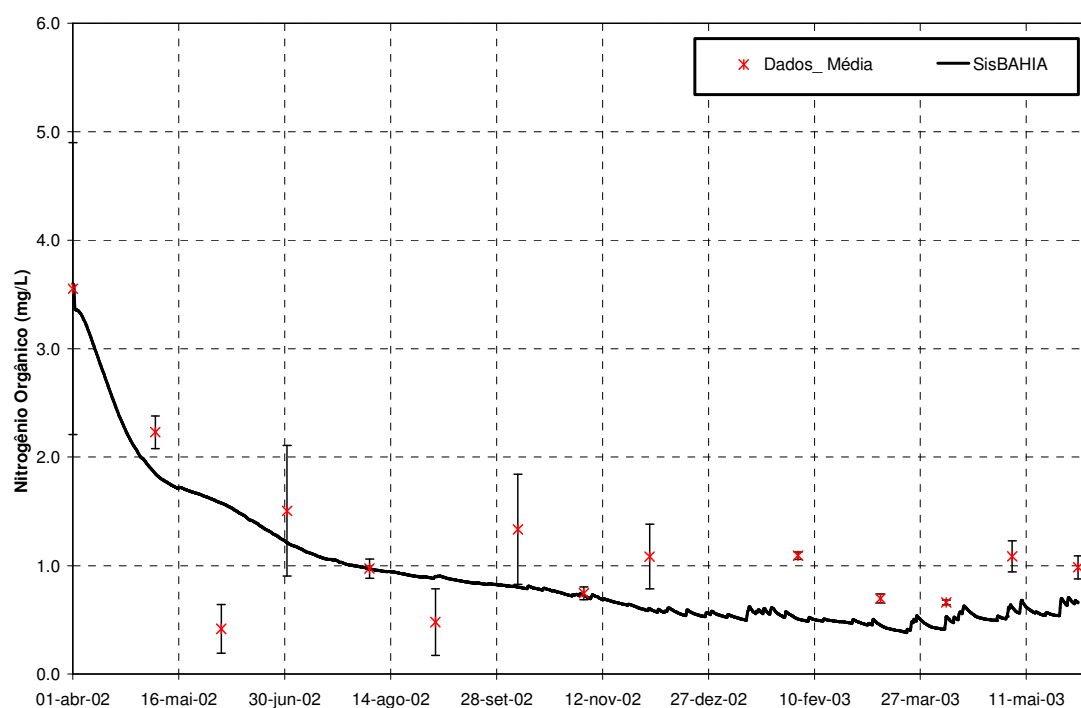


FIGURA 61 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

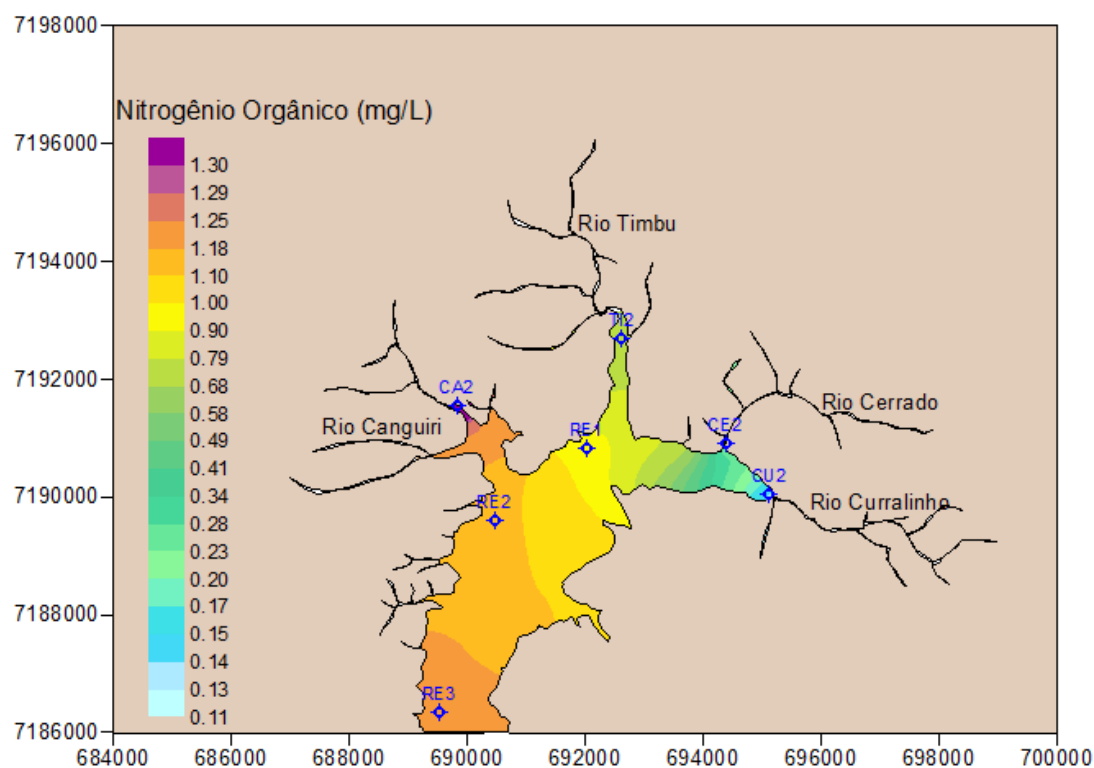


FIGURA 62 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

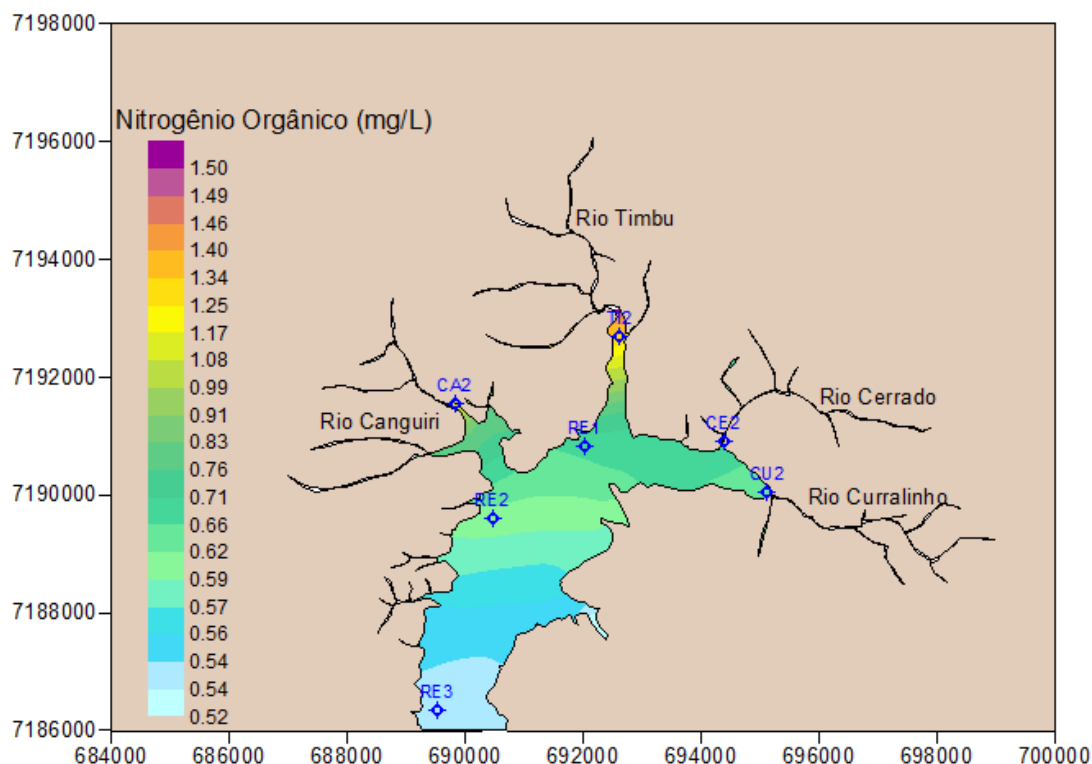


FIGURA 63 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

Na Figura 64, Figura 65 e Figura 66 são mostrados os resultados obtidos pelo SisBaHIA® para a variável DBO. A DBO apresentou erros relativos médios próximos nos três pontos amostrais. É possível visualizar a influência direta das condições de contorno dos rios Timbu e Canguiri nos resultados dos pontos RE1 e RE2, nas distribuições espaciais mostradas na Figura 67 e Figura 68. Há uma tendência de diminuição da DBO ao longo do reservatório, já que a matéria orgânica proveniente dos tributários está sujeita aos processos de sedimentação e decomposição.

A Figura 69, a Figura 70 e a Figura 71 mostram os resultados da variável OD. Pode-se notar que o SisBaHIA® representou adequadamente a tendência observada nos dados medidos ao longo do ano, com valores maiores nos meses de inverno e menores nos meses de verão, devido à influência da temperatura da água no OD de saturação. O OD apresentou os erros mais significativos no ponto RE3. Nas distribuições espaciais mostradas na Figura 72 e Figura 73 é possível observar a tendência de aumento na concentração de OD ao longo do reservatório, causada principalmente pelo processo de reaeração.

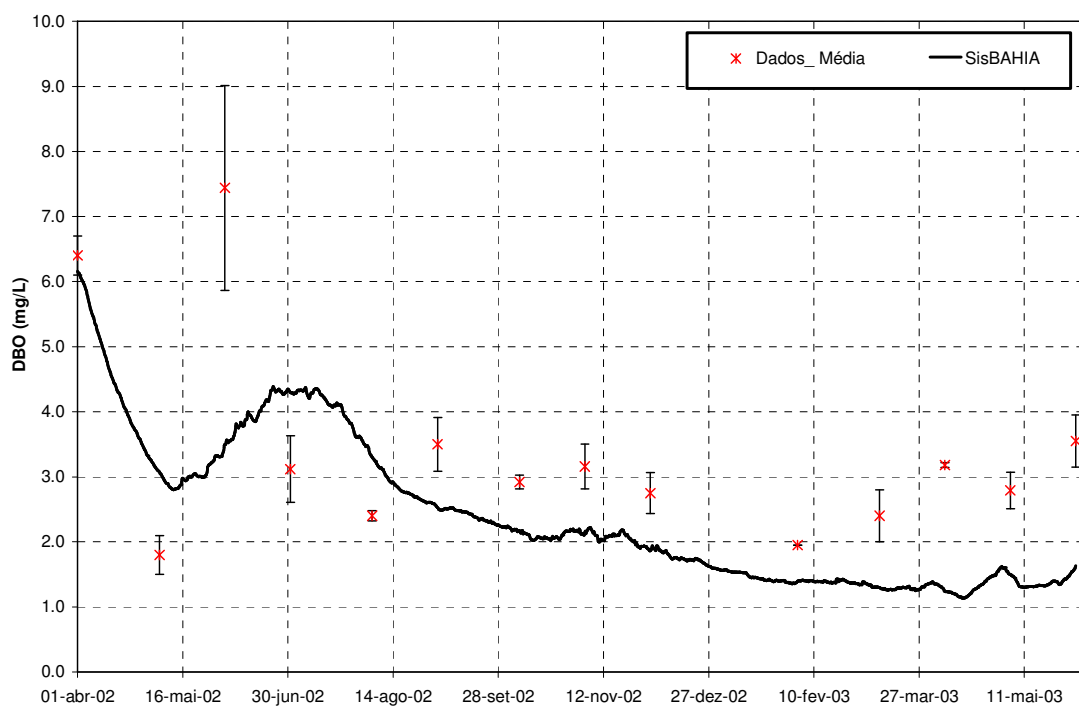


FIGURA 64 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

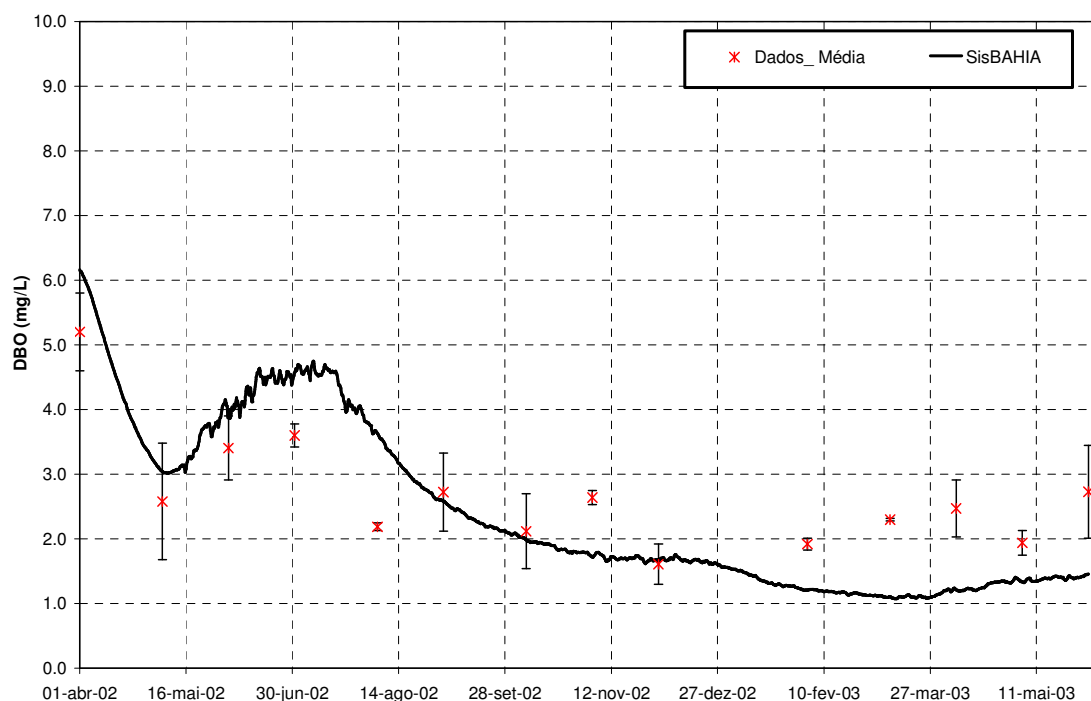


FIGURA 65 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

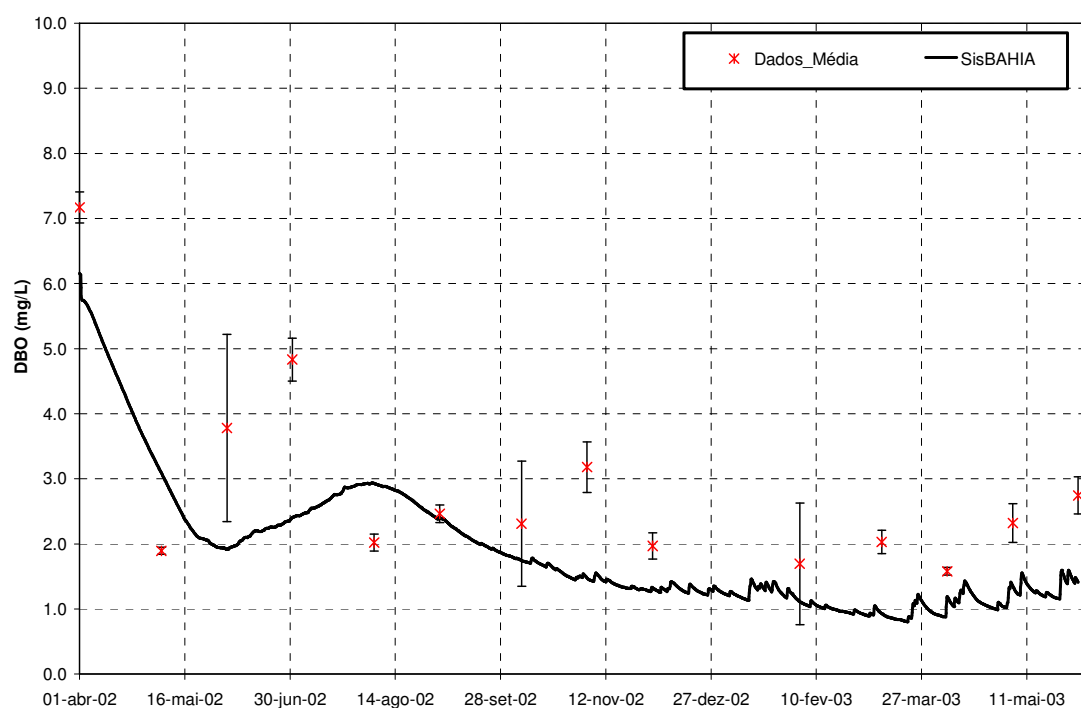


FIGURA 66 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

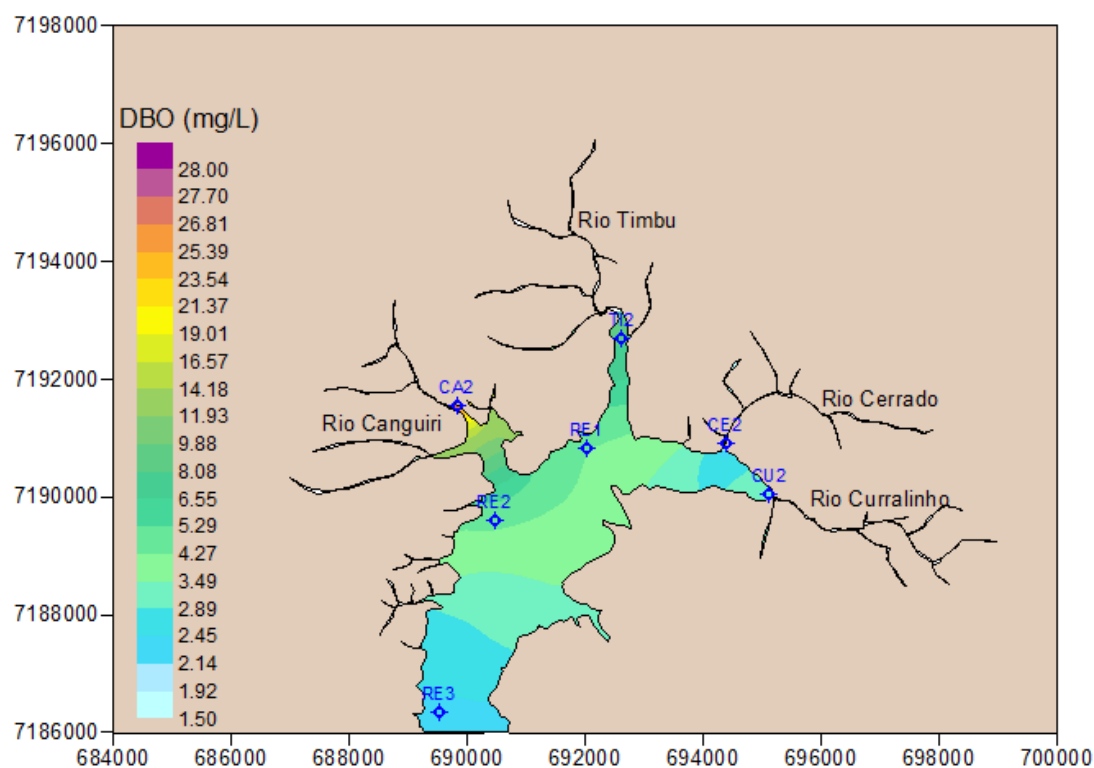


FIGURA 67 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE DBO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

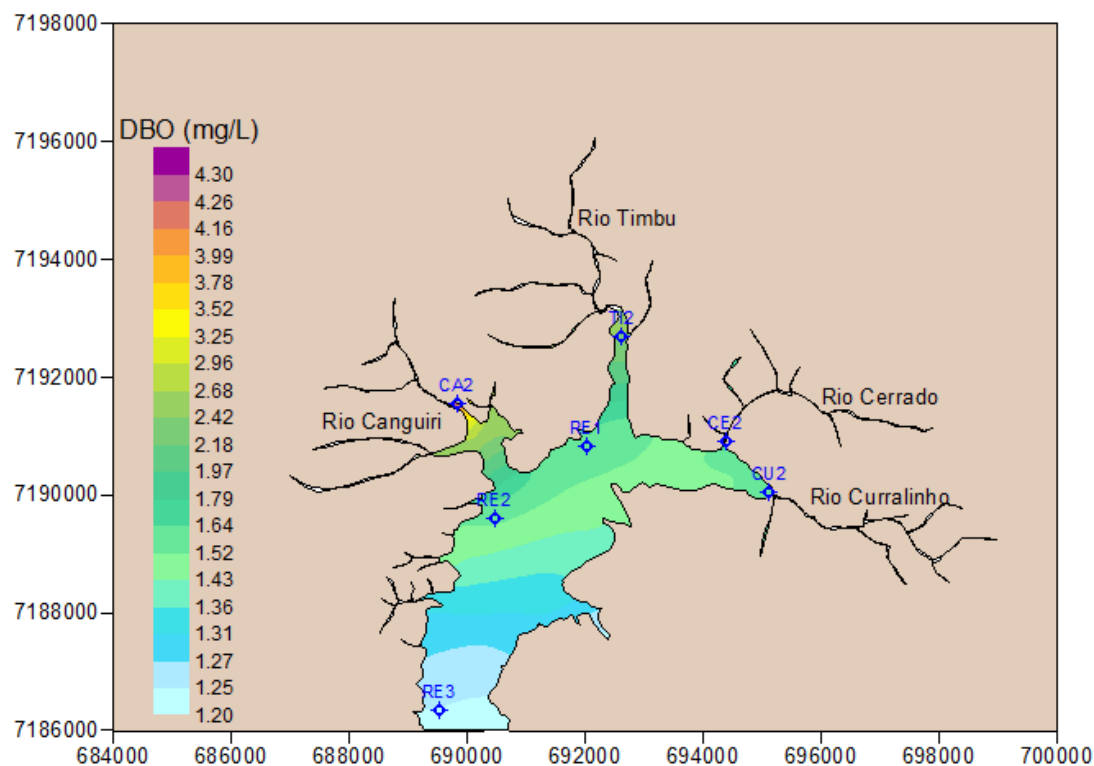


FIGURA 68 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE DBO SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

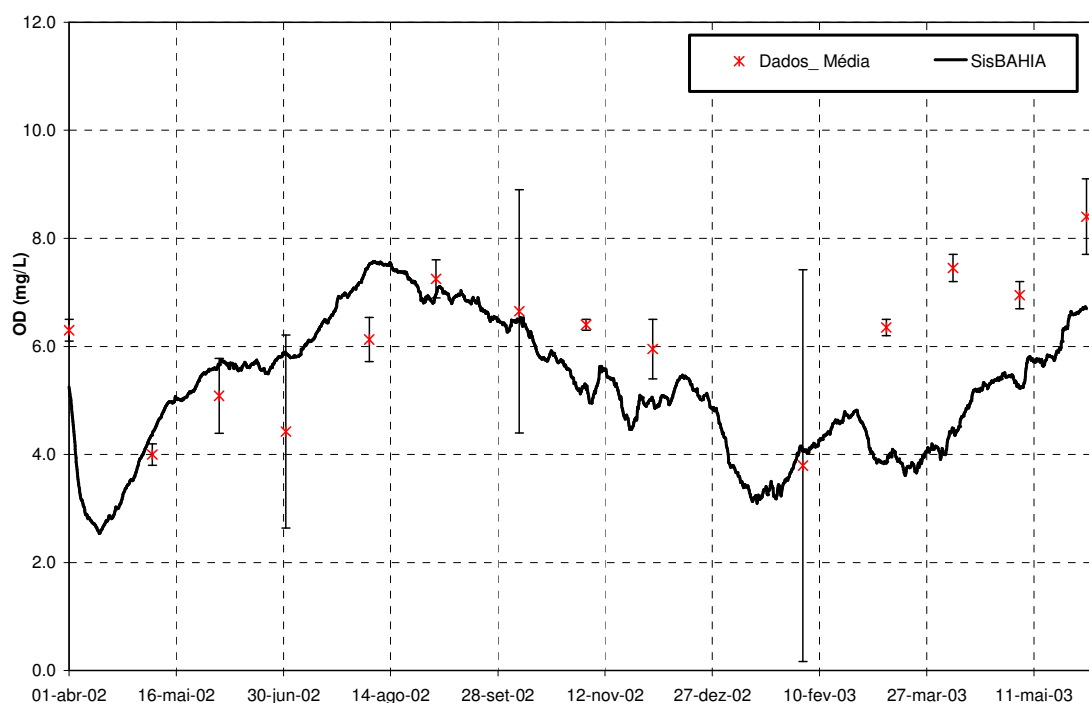


FIGURA 69 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1

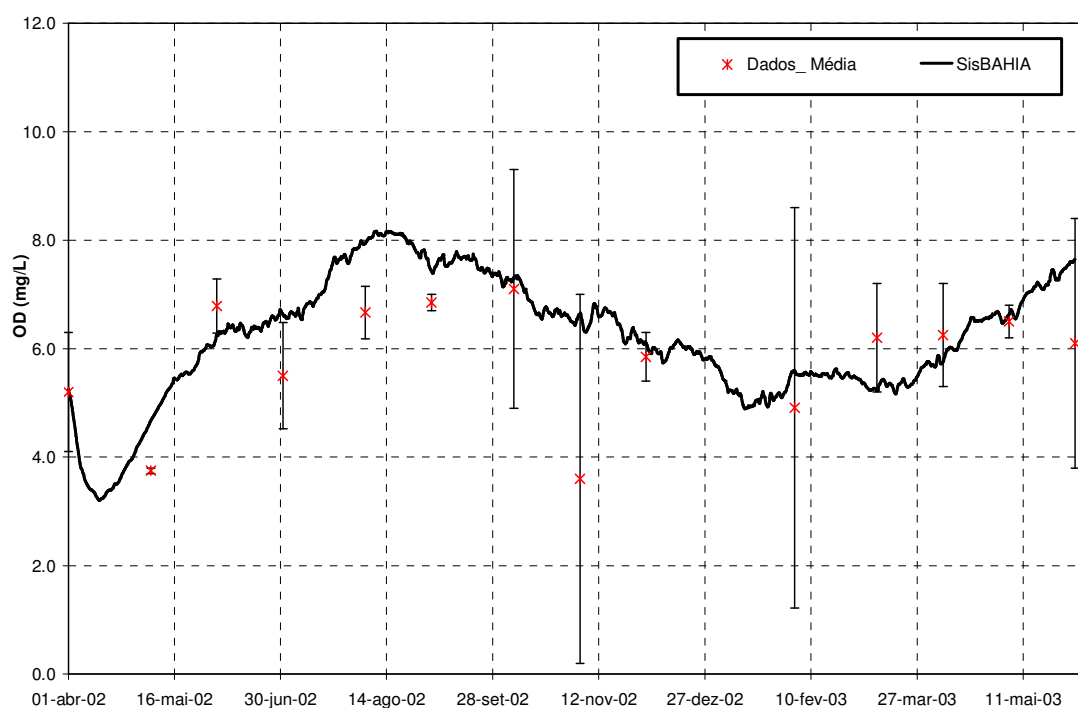


FIGURA 70 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2

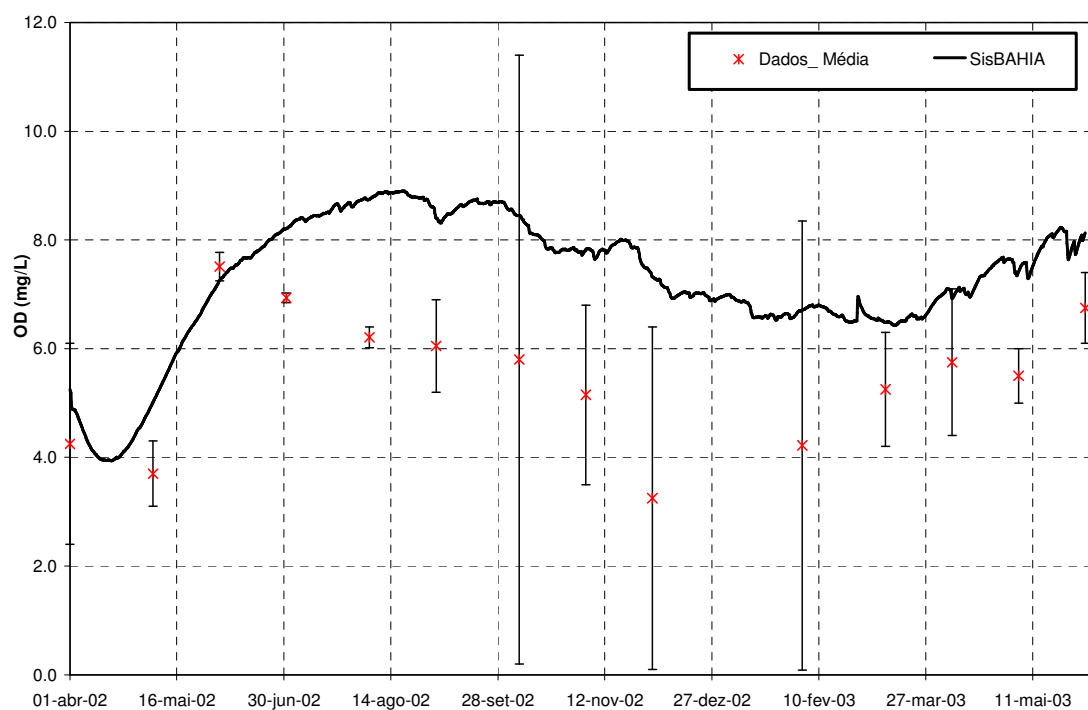


FIGURA 71 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE3

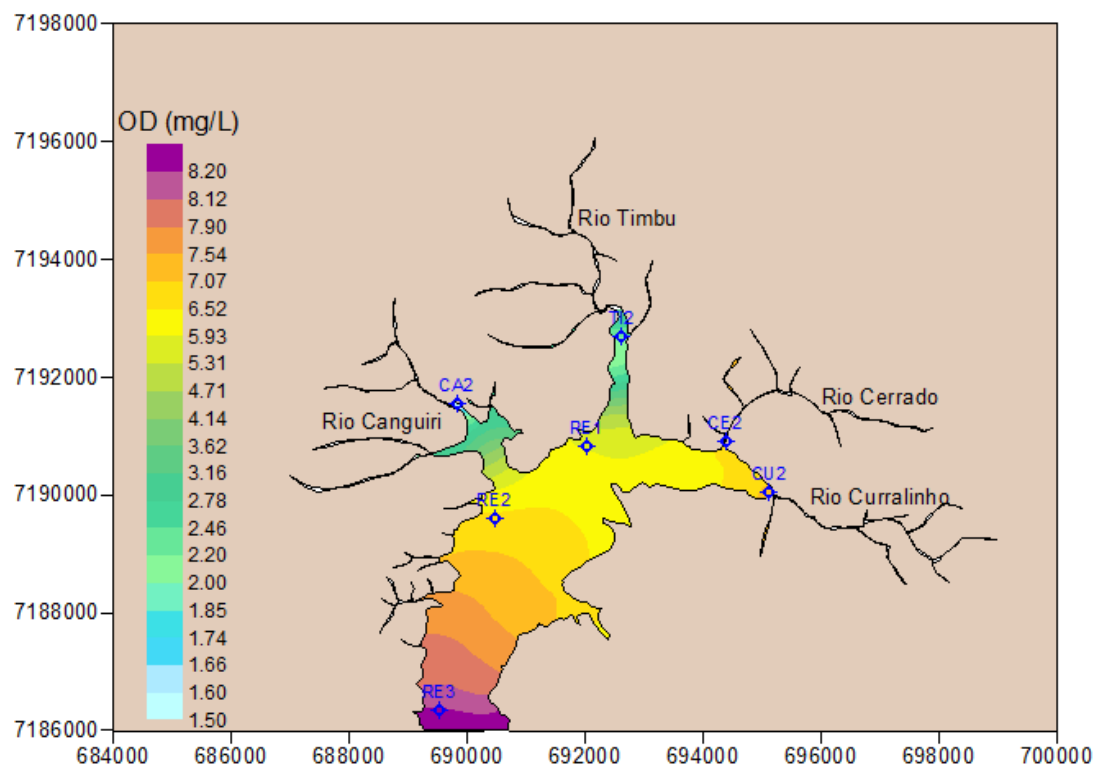


FIGURA 72 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE OD SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

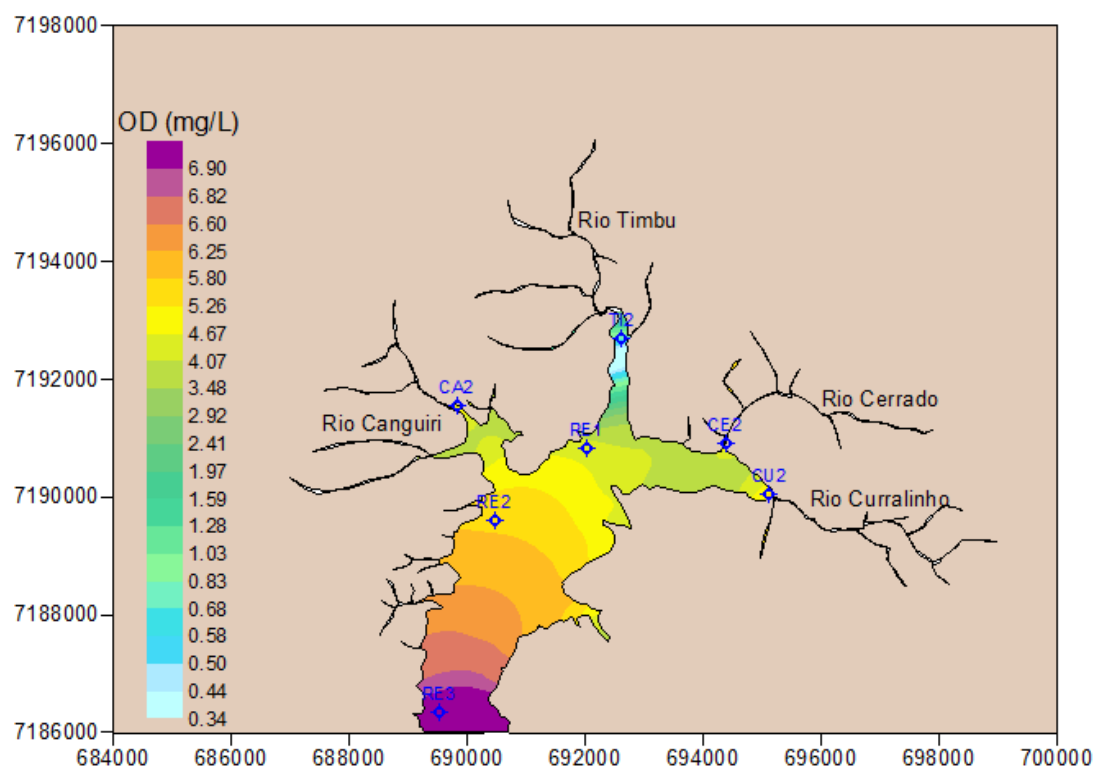


FIGURA 73 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA CONCENTRAÇÃO DE OD SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

5.4.2 Calibração com Zooplâncton Herbívoro

A seguir são apresentados os resultados da calibração considerando a variável zooplâncton herbívoro. A Tabela 4 mostra o erro relativo médio calculado na comparação entre os resultados do modelo e os dados das variáveis nos pontos de amostragem. Assim como citado na calibração anterior, os erros relativos médios mostrados na Tabela 4 não podem ser considerados como os menores possíveis, representando apenas os erros obtidos nesta calibração. Novamente o erro relativo médio para a variável clorofila *a* foi menor no ponto 502, no qual foram realizadas análises em três profundidades.

TABELA 4 - ERROS RELATIVOS MÉDIOS NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNTON

Variável/ Ponto	a	L	PO	P	NA	NO	NI	OD
RE1	0,60	0,35	1,90	0,56	1,75	0,38	0,96	0,18
RE2	0,49	0,40	0,60	0,76	2,47	0,36	0,64	0,13
RE3	0,86	0,33	0,46	0,52	3,33	0,46	0,61	0,34
502	0,43	-	-	-	-	-	-	-

Por simplificação, apenas os gráficos com os resultados de clorofila *a* (Figura 74 à Figura 77) e de zooplâncton herbívoro (Figura 78 à Figura 81) serão mostrados. Os resultados de zooplâncton não foram comparados aos dados, devido à grande incerteza associada à transformação de unidades de org./m³ para mgC/L, considerada para a imposição da condição inicial. A seguir, no item comparação entre as simulações, podem ser visualizadas as diferenças entre os resultados das calibrações sem e com zooplâncton herbívoro para todas as variáveis do MQA.

As distribuições espaciais de concentração de clorofila *a* ficaram similares às encontradas anteriormente, não sendo mostradas. As distribuições espaciais de concentração de zooplâncton, apresentadas na Figura 82 e na Figura 83, mostram o seu crescimento ao longo do reservatório, apesar das baixas concentrações (0,005 mgC/L) consideradas nas condições de contorno. Assim, as maiores concentrações foram encontradas na zona lântica do reservatório.



FIGURA 74 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE1 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON

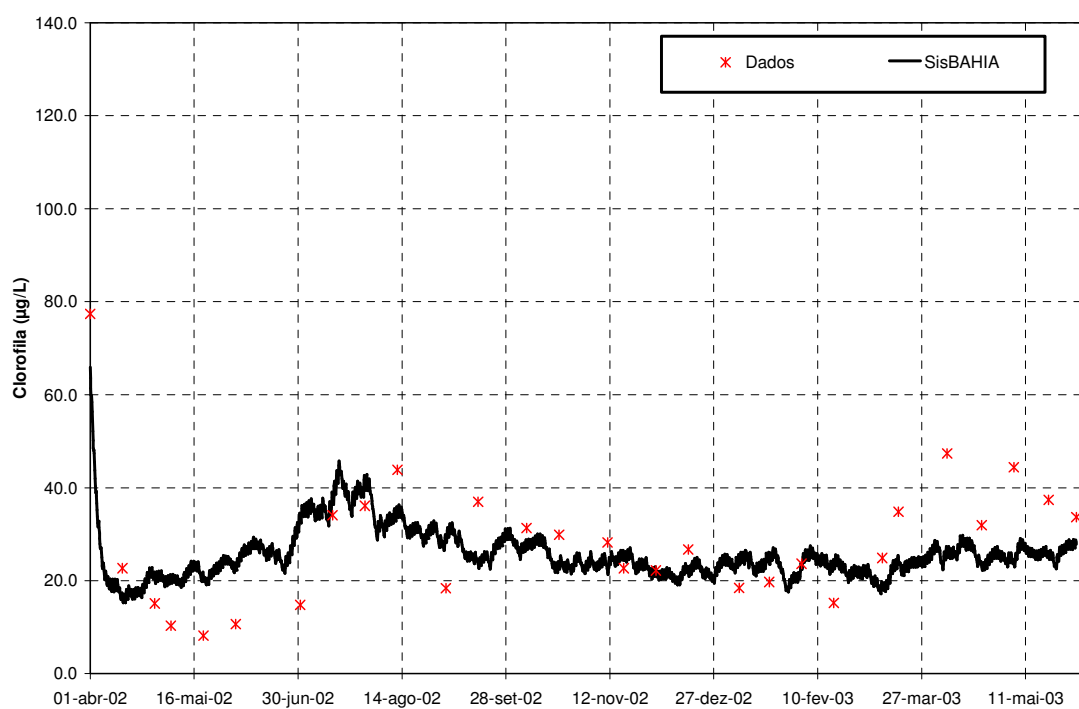


FIGURA 75 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO RE2 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNCTON

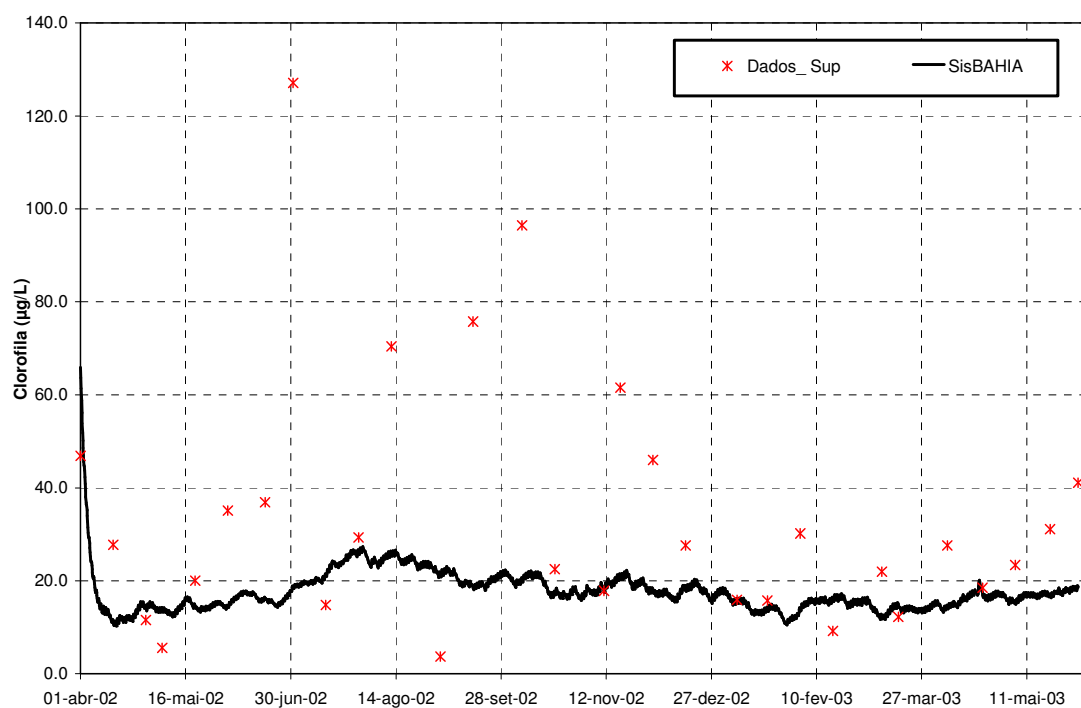


FIGURA 76 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS PONTO RE3 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNTON

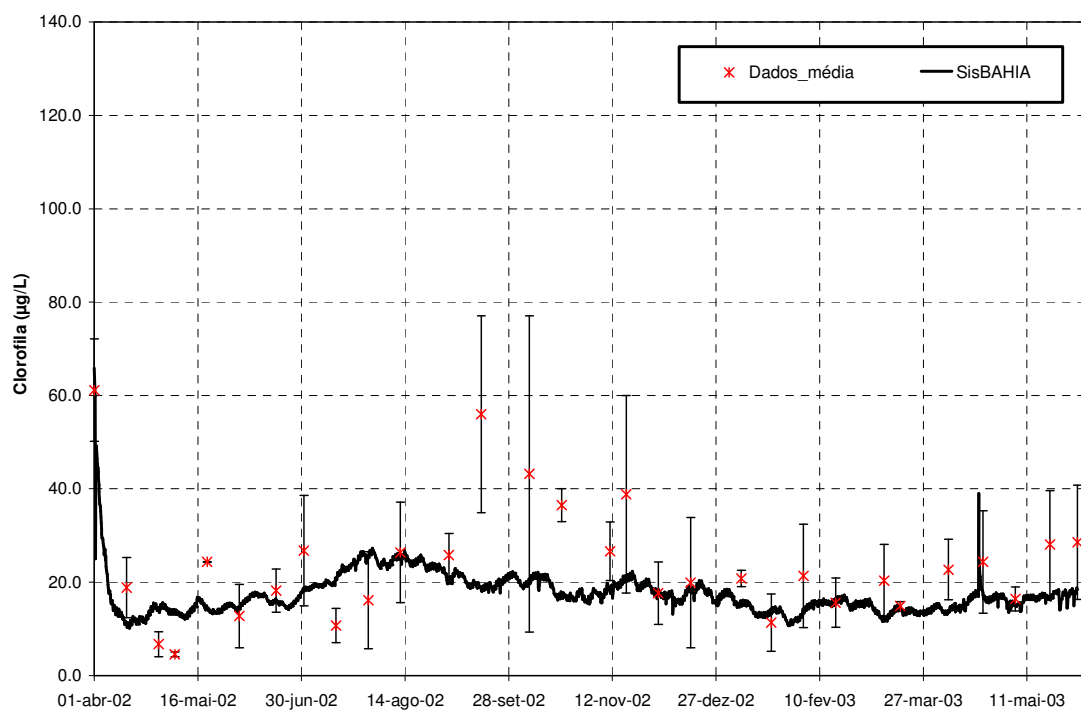


FIGURA 77 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® E MEDIDOS NO PONTO 502 NA CALIBRAÇÃO COM ZOOPLÂNTON

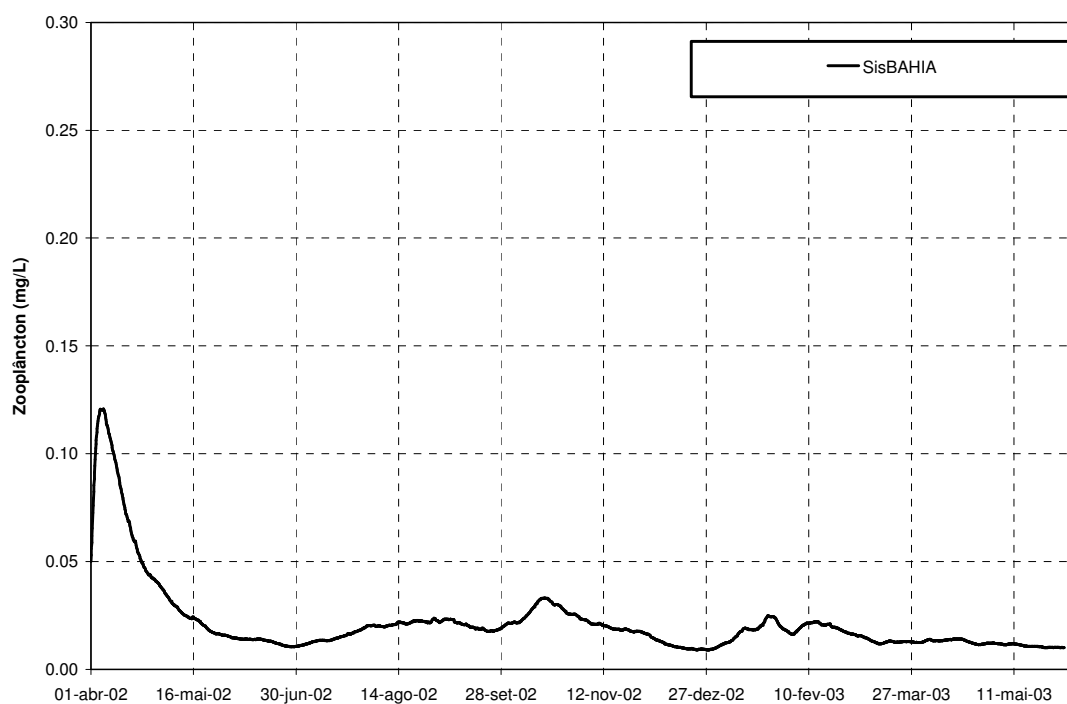


FIGURA 78 – VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA[®] NO PONTO RE1

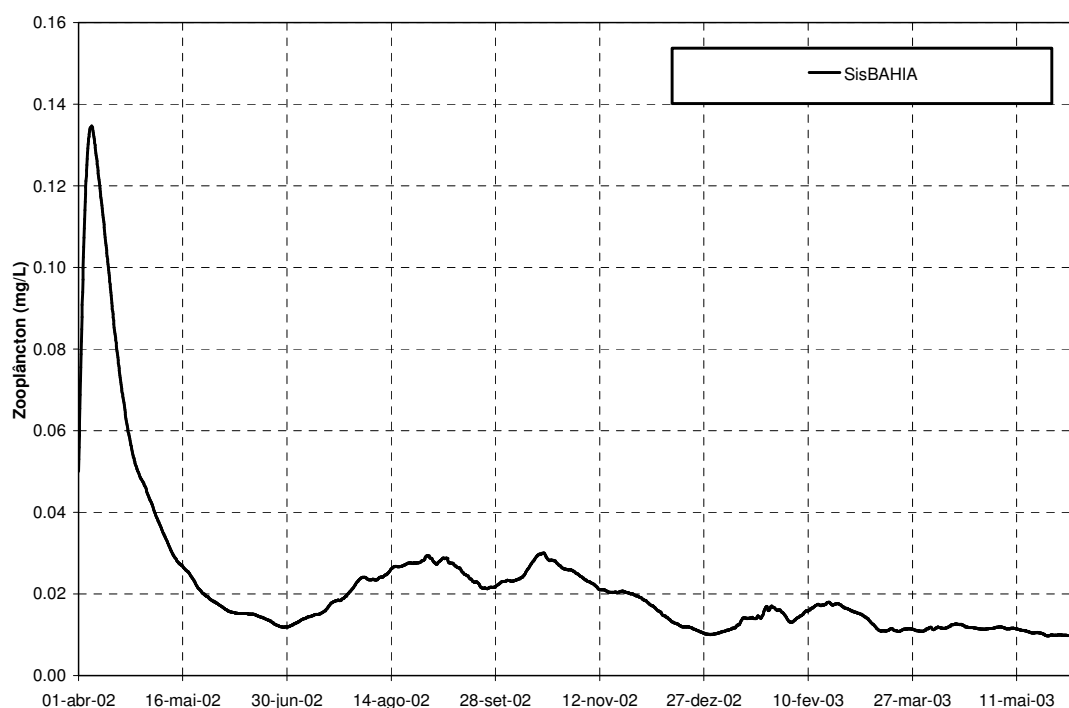


FIGURA 79 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA[®] NO PONTO RE2

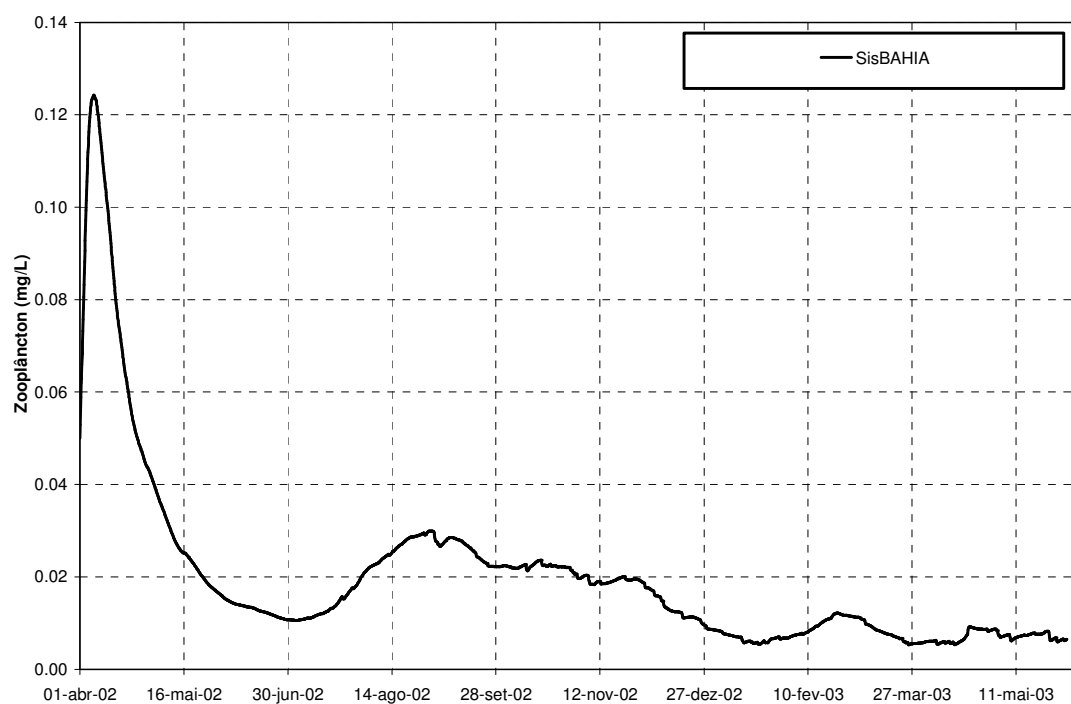


FIGURA 80 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO RE3

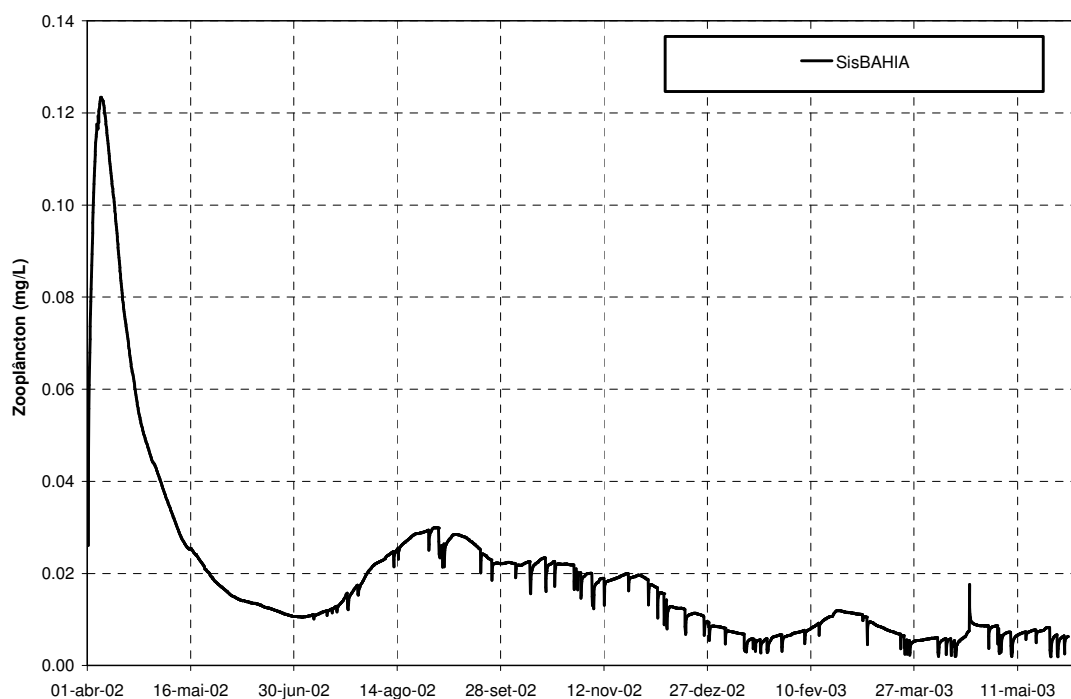


FIGURA 81 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS NUMERICAMENTE PELO SISBAHIA® NO PONTO 502

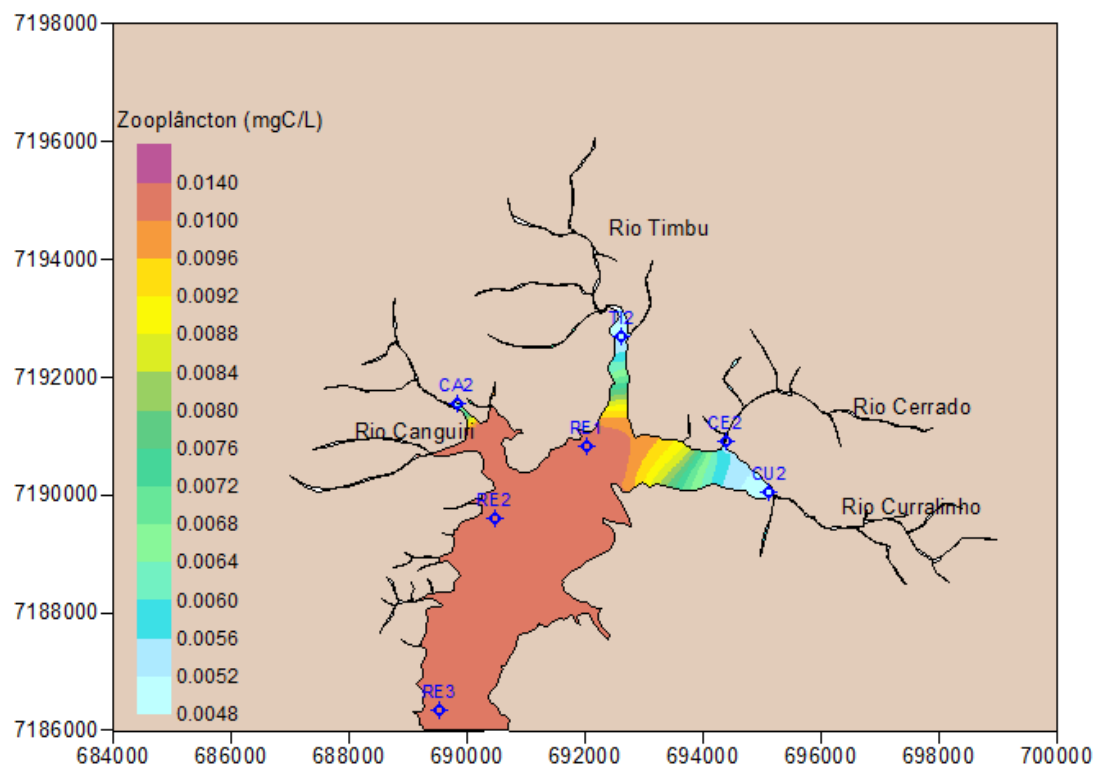


FIGURA 82 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE ZOOPLÂNCTON SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/07/02

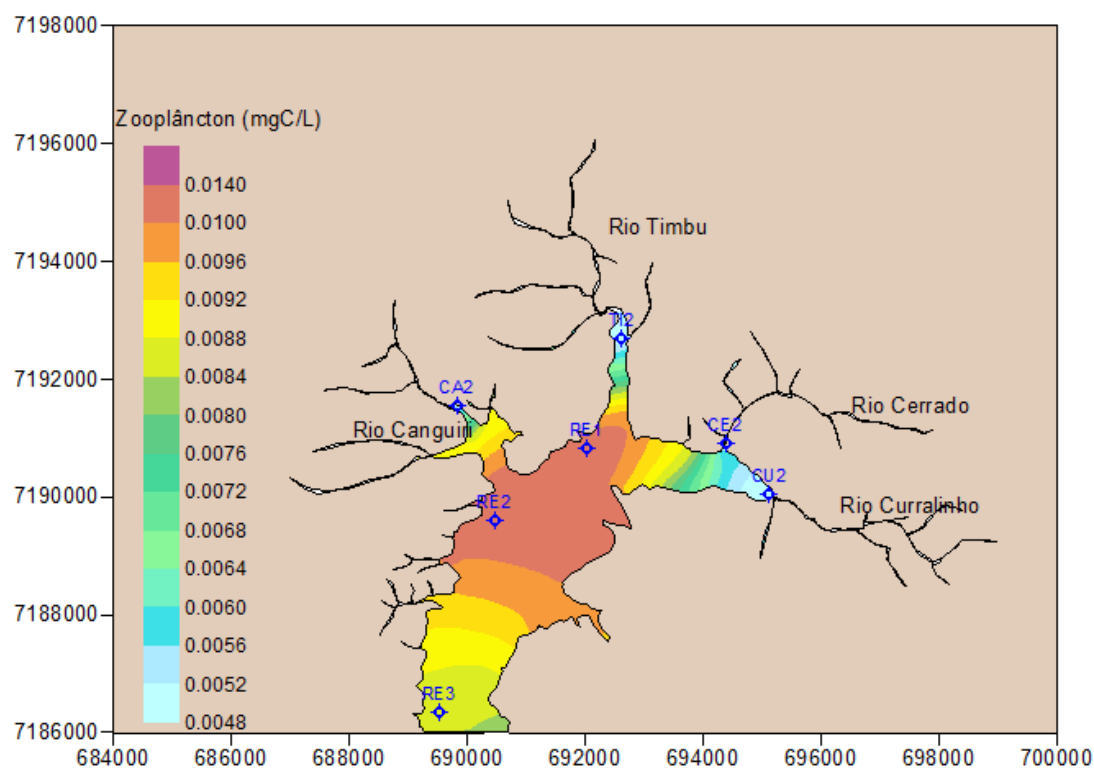


FIGURA 83 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE ZOOPLÂNCTON SIMULADA PELO SISBAHIA® EM 01/01/03

5.5 COMPARAÇÃO ENTRE AS SIMULAÇÕES

A seguir são apresentadas as comparações entre os resultados das simulações realizadas. Como citado anteriormente, no cenário 1 foi considerado um aumento de dez vezes nas concentrações normais de fosfato reativo e de fosfato orgânico nos tributários do reservatório do Iraí, e no cenário 2 estas concentrações foram divididas por dez. Por simplificação, apenas os resultados no ponto RE2 são mostrados, considerando que houve um comportamento semelhante nos outros pontos.

5.5.1 Aumento da Concentração de Fósforo nos Tributários

Na Tabela 5 podem ser visualizadas as porcentagens do período de simulação em que o reservatório permaneceu em cada nível trófico na calibração e no cenário 1, considerando os resultados de clorofila *a* obtidos através do SisBaHIA[®] para o ponto RE2. O nível trófico em cada instante foi calculado de acordo com os valores definidos por Lamparelli (2004), mostrados no Quadro 2. Pode-se observar que houve diferenças significativas entre a calibração e o cenário 1, sem a variável zooplâncton herbívoro, sendo que o reservatório passou do nível eutrófico para supereutrófico durante a maior parte da simulação, chegando ao nível hipereutrófico em 21,8 % dos resultados. Entretanto, ao se considerar a variável zooplâncton herbívoro, as diferenças entre os resultados da calibração e do cenário 1 não foram significativas, devido à redução da concentração de clorofila *a* causada pelo processo de herbivoria.

Na Figura 84 as diferenças entre as concentrações de clorofila *a* calculadas em cada simulação podem ser visualizadas, ficando claro o aumento observado no cenário 1 sem zooplâncton. Na Figura 85 é possível ver que houve um aumento significativo da concentração de zooplâncton no cenário 1 com zooplâncton, causando um maior consumo de fitoplâncton. As respostas nas concentrações de fosfato reativo e fosfato orgânico, devido às mudanças realizadas nas suas

condições de contorno, são mostradas na Figura 86 e na Figura 87.

Nível Trófico	Calibração sem zooplâncton (%)	Cenário 1 sem zooplâncton (%)	Calibração com zooplâncton (%)	Cenário 1 com zooplâncton (%)
Ultraoligotrófico	0	0	0	0
Oligotrófico	0	0	0	0
Mesotrófico	1,4	0	0	0
Eutrófico	95,3	0	85,8	81,6
Supereutrófico	3,3	78,2	14,2	18,4
Hipereutrófico	0	21,8	0	0

TABELA 5 – NÍVEIS TRÓFICOS OBSERVADOS NO PONTO RE2 DURANTE O PERÍODO DE SIMULAÇÃO CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

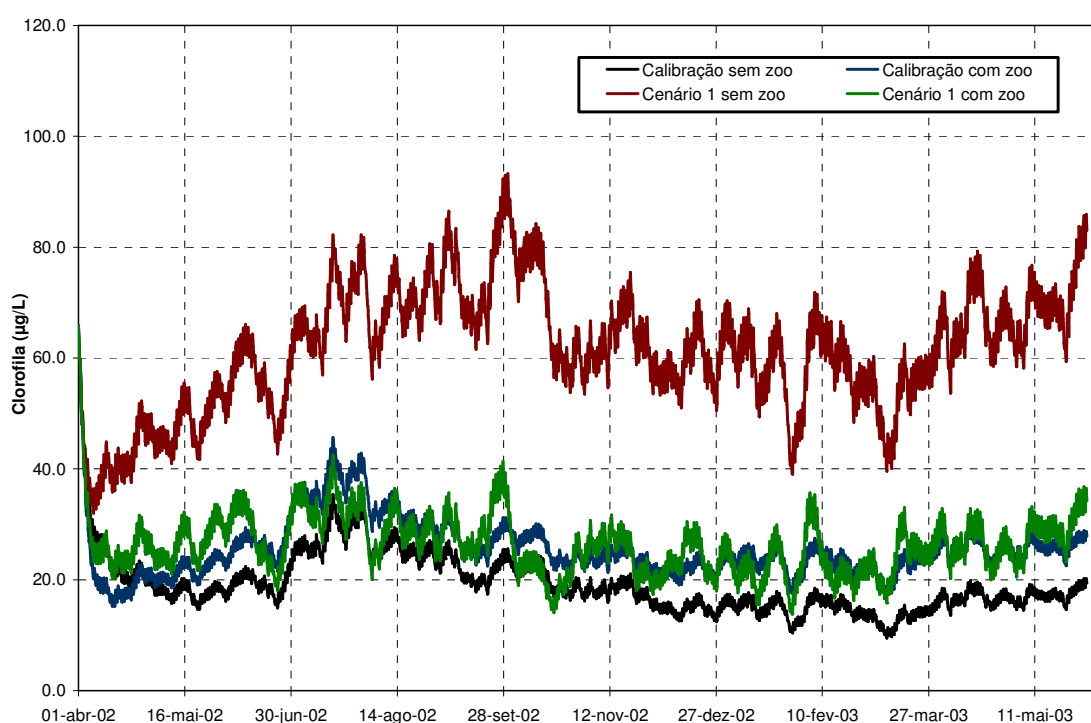


FIGURA 84 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

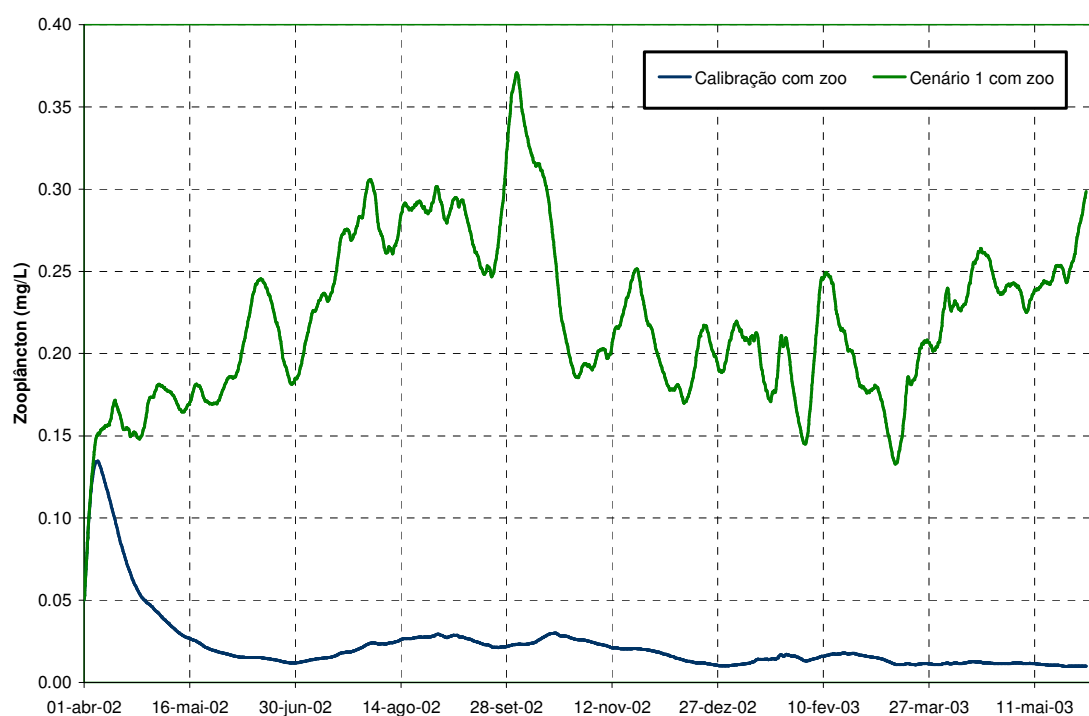


FIGURA 85 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

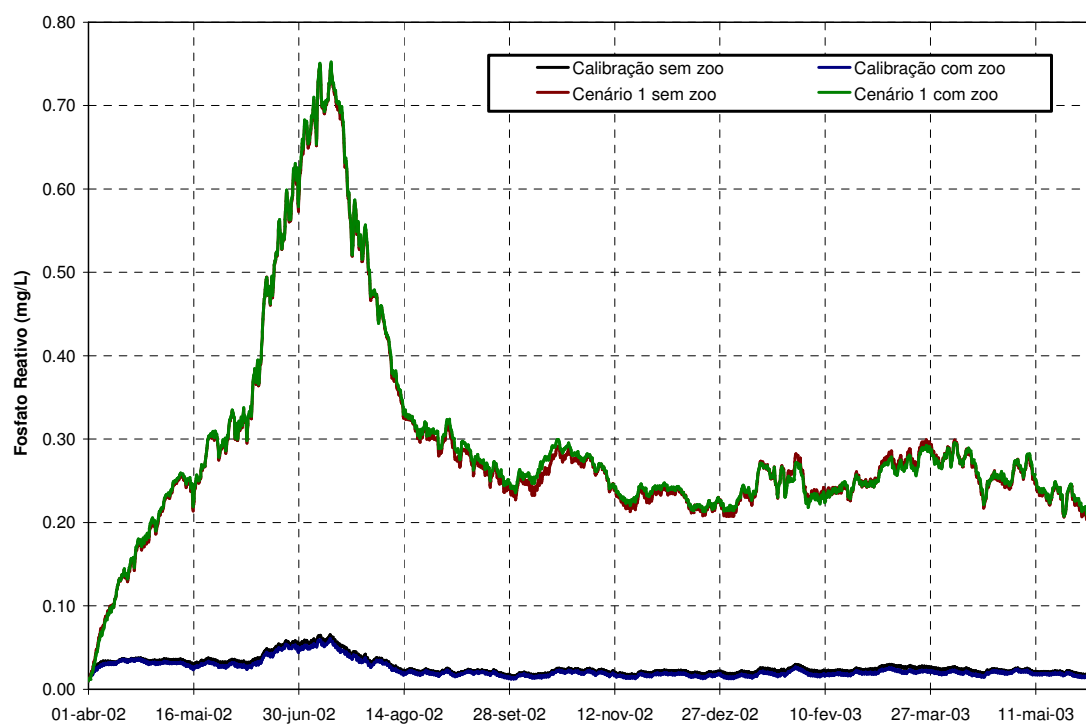


FIGURA 86 - VALORES DE COCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

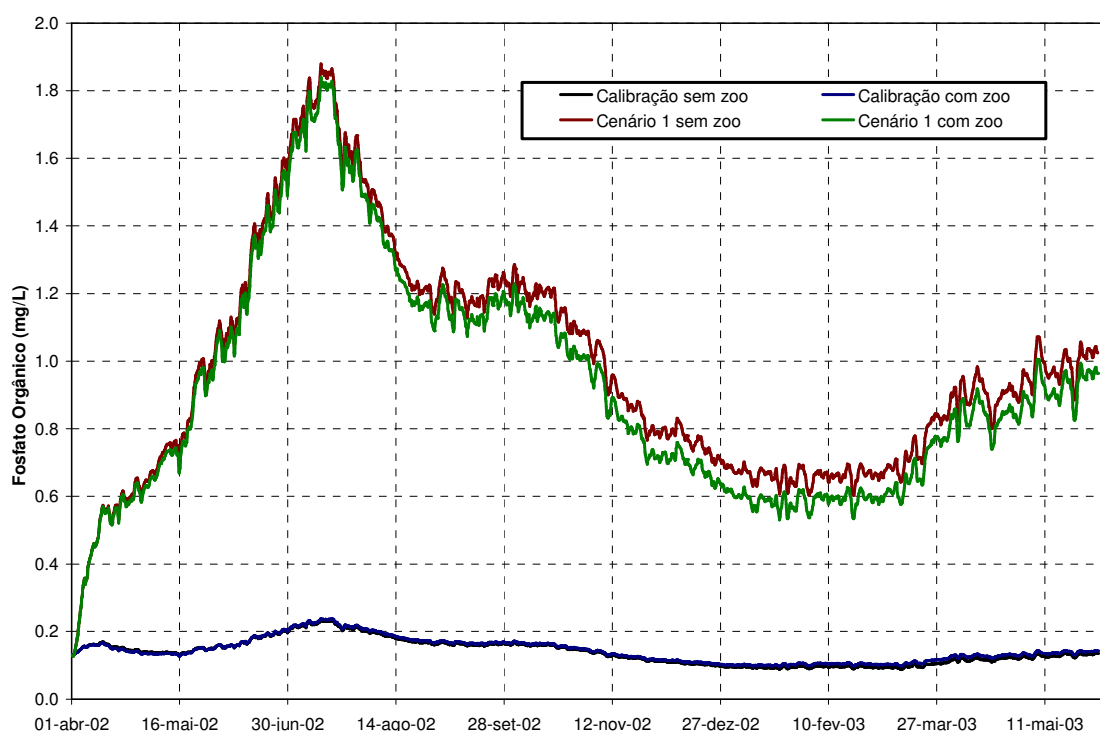


FIGURA 87 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

Na Figura 88, Figura 89 e Figura 90 são mostrados os resultados de nitrato, de amônia e de nitrogênio orgânico. O aumento da concentração de clorofila *a* no cenário 1 causou o aumento do consumo de nitrogênio inorgânico, visualizado principalmente na diminuição da concentração de nitrato. No caso da amônia, o aumento do consumo foi balanceado pelos processos de respiração e morte de fitoplâncton e zooplâncton herbívoro, e pelo processo de amonificação. Com o crescimento de fitoplâncton, houve um aumento na concentração de nitrogênio orgânico causado pelos processos de excreção, mortalidade e herbivoria, principalmente no cenário 1 sem zooplâncton.

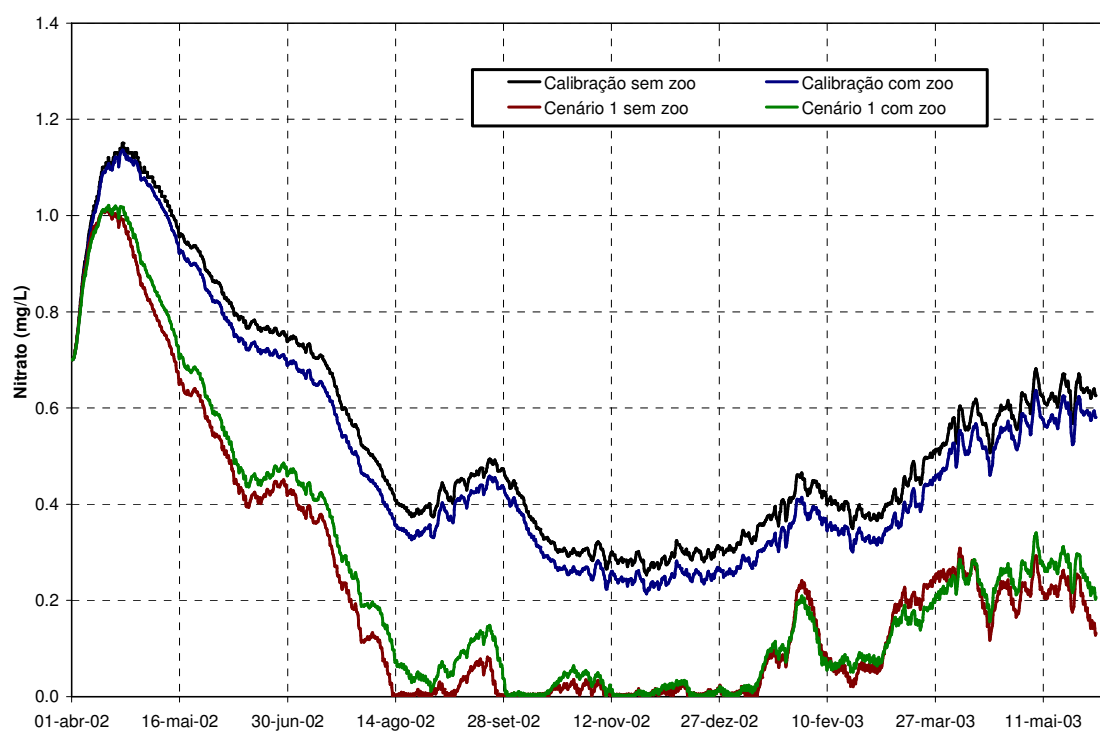


FIGURA 88 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

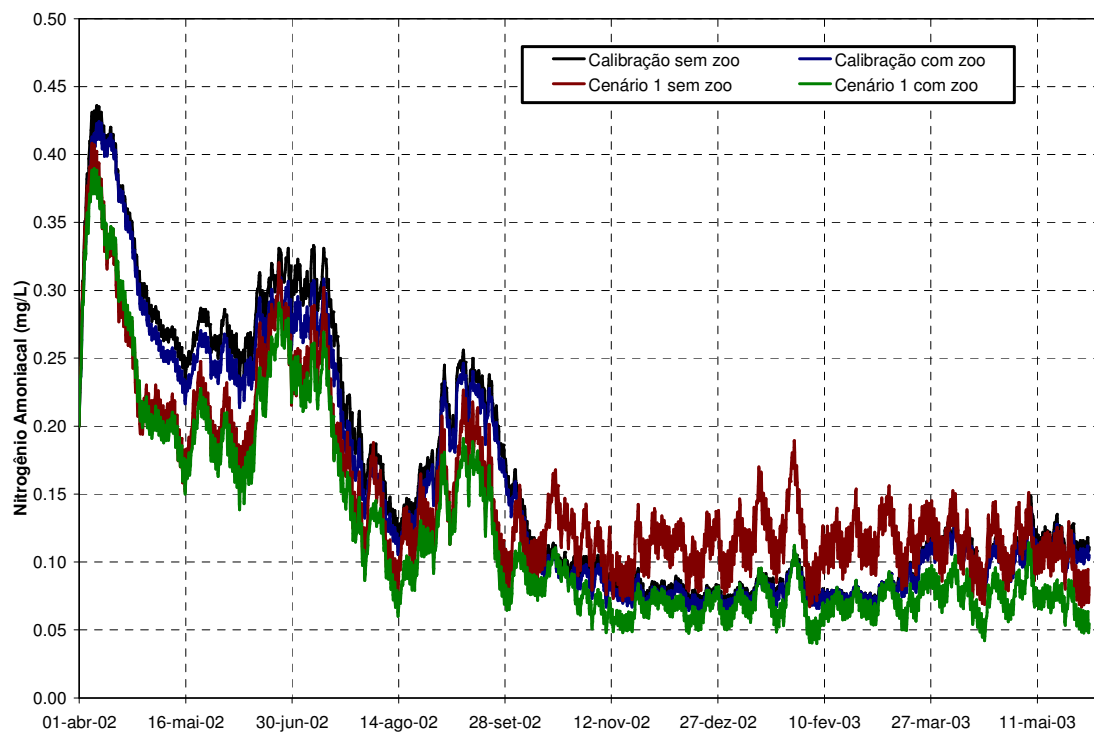


FIGURA 89 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

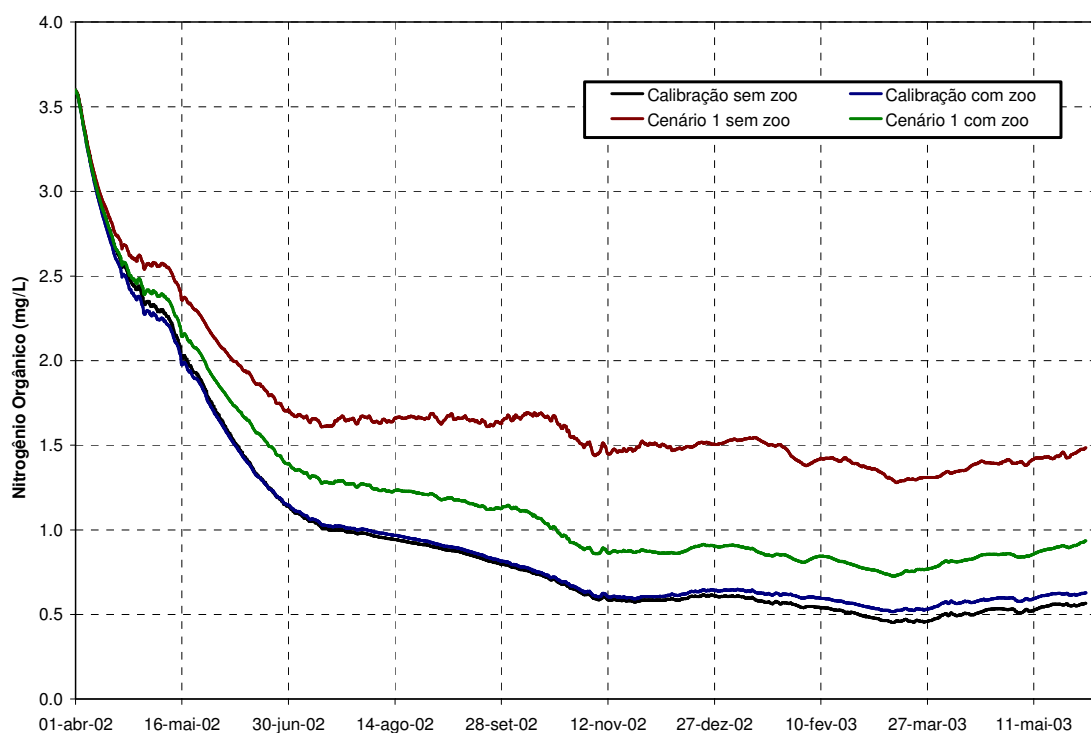


FIGURA 90 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

Nas Figura 91 e na Figura 92 são mostrados os resultados de OD e de DBO. O aumento da concentração de clorofila *a* observado no cenário 1 representou um aumento na concentração de DBO. No caso da simulação sem zooplâncton, este aumento está relacionado apenas com a morte de fitoplâncton. No caso da simulação com zooplâncton, além do aumento causado pela morte de fitoplâncton, também influenciam na concentração de DBO a morte de zooplâncton e os detritos da herbivoria. Devido ao aumento da concentração de DBO, houve uma diminuição na concentração de OD durante a maior parte da simulação do cenário 1. Além do processo de decomposição, os processos de respiração, fotossíntese e nitrificação também influenciaram nas diferenças encontradas nos resultados de OD.

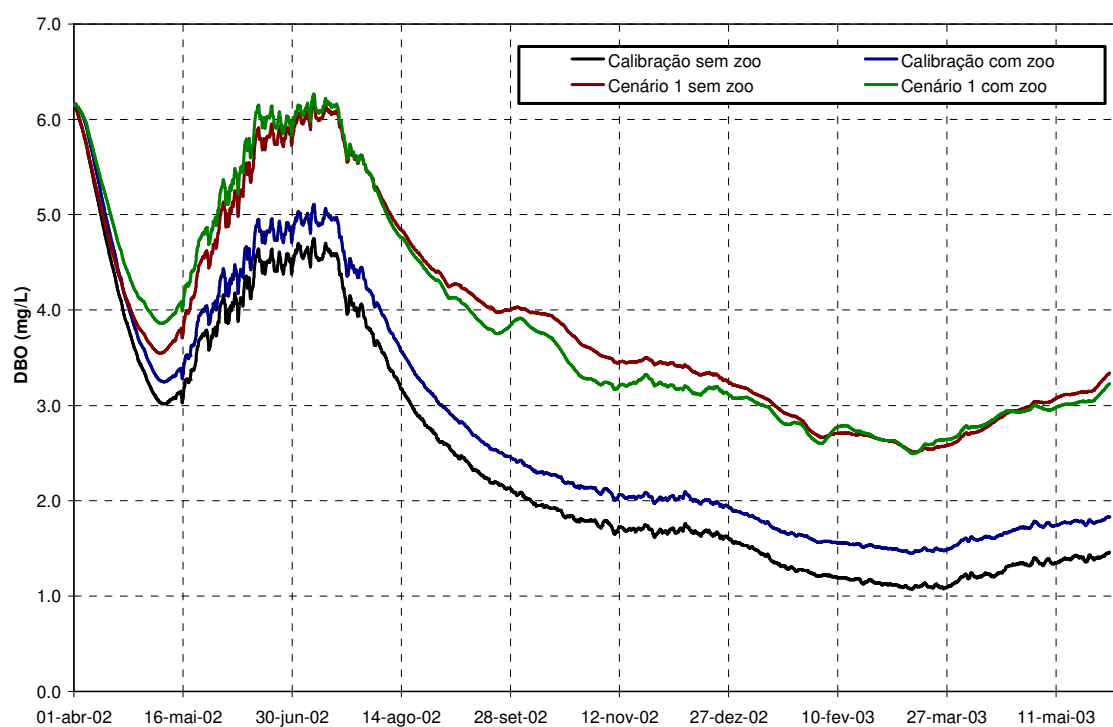


FIGURA 91 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

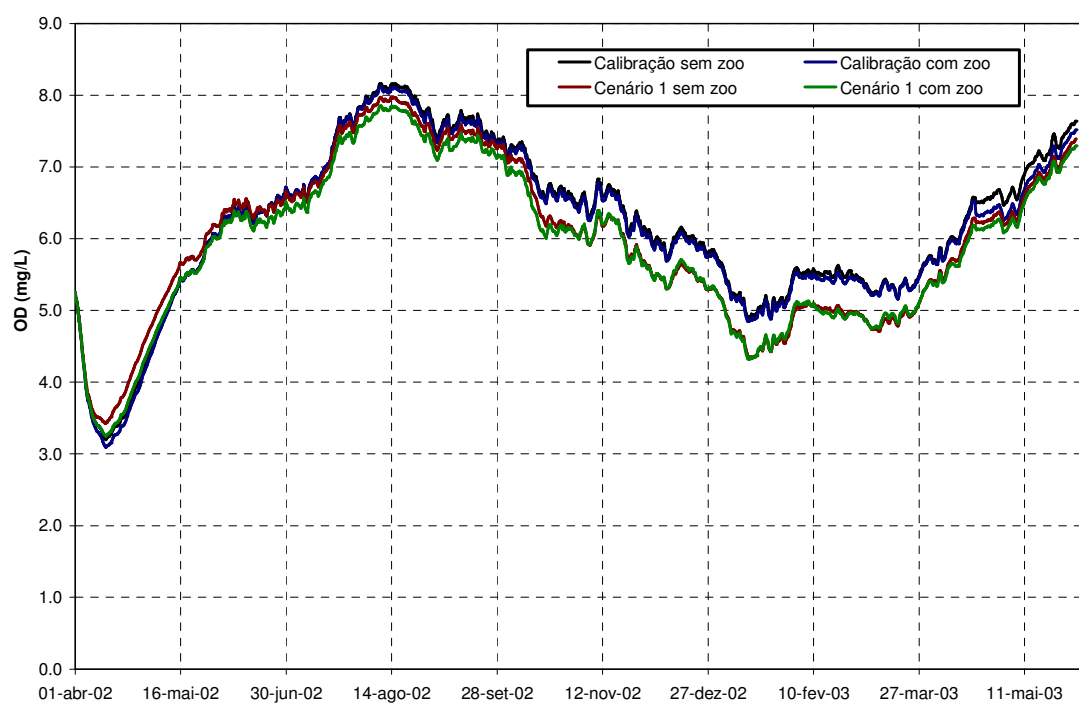


FIGURA 92 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 1

5.5.2 Diminuição na Concentração de Fósforo nos Tributários

Na Tabela 6 são mostradas as porcentagens do período de simulação em que o reservatório permaneceu em cada nível trófico na calibração e no cenário 2, considerando os resultados de clorofila *a* obtidos através do SisBaHIA[®] para o ponto RE2. Houve uma melhora significativa no grau de trofia observado, devido ao aumento da limitação do crescimento do fitoplâncton provocado pela redução da concentração de fósforo. Entretanto, o reservatório ainda se manteve como eutrófico em 5,7 % do período de simulação do cenário 2 sem a variável zooplâncton herbívoro, e em 7,3 % do período de simulação do cenário 2 considerando esta variável. As diferenças entre os níveis tróficos encontrados no cenário 2 podem ser explicadas pela redução do valor da taxa de perdas do fitoplâncton por respiração e excreção (k_{ra}), considerada na calibração com zooplâncton (Quadro 15). Este foi o parâmetro de maior influência na concentração de clorofila *a* encontrado na análise de sensibilidade.

Nível Trófico	Calibração sem zooplâncton (%)	Cenário 2 sem zooplâncton (%)	Calibração com zooplâncton (%)	Cenário 2 com zooplâncton (%)
Ultraoligotrófico	0	71,4	0	55,8
Oligotrófico	0	11,2	0	17,5
Mesotrófico	1,4	10,4	0	18,5
Eutrófico	95,3	5,7	85,8	7,3
Supereutrófico	3,3	1,2	14,2	0,9
Hipereutrófico	0	0	0	0

TABELA 6 - NÍVEIS TRÓFICOS OBSERVADOS NO PONTO RE2 DURANTE O PERÍODO DE SIMULAÇÃO CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

As concentrações de clorofila *a* obtidas com o SisBaHIA[®] podem ser visualizadas na Figura 93. Como no cenário 2 não havia condições para que o fitoplâncton pudesse crescer em grandes quantidades, a concentração de zooplâncton permaneceu bem abaixo da simulação em condições normais, como pode ser observado na Figura 94. As respostas nas concentrações de fosfato reativo e fosfato orgânico, devido à diminuição nas suas condições de contorno, são mostradas na Figura 95 e na Figura 96.

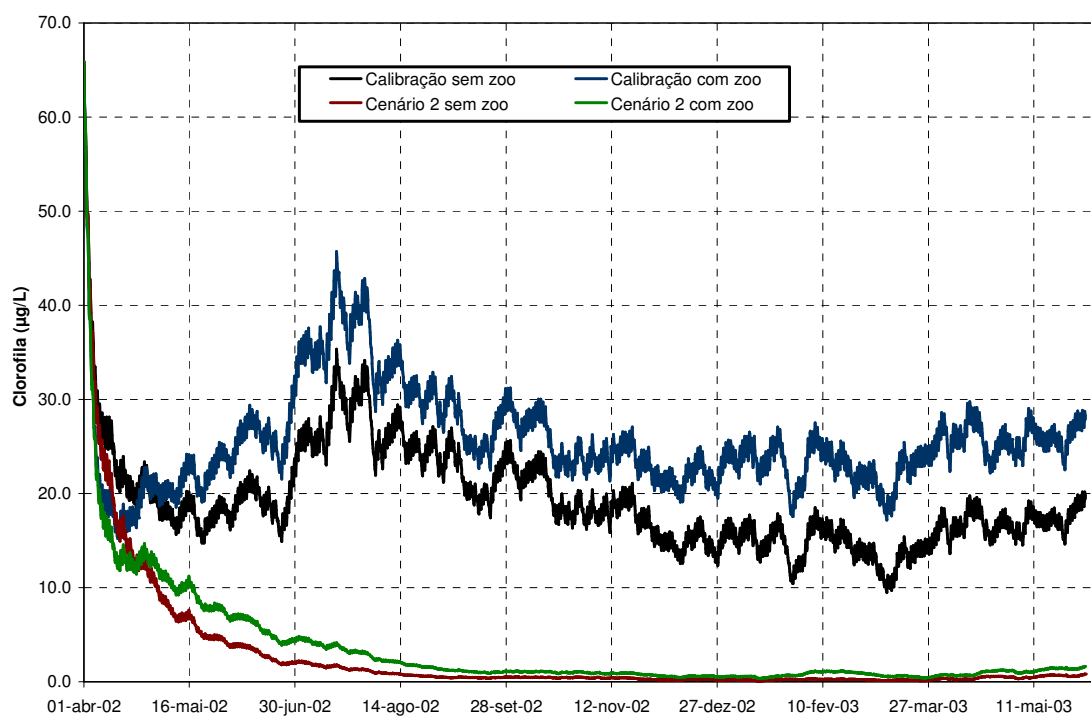


FIGURA 93 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE CLOROFILA OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

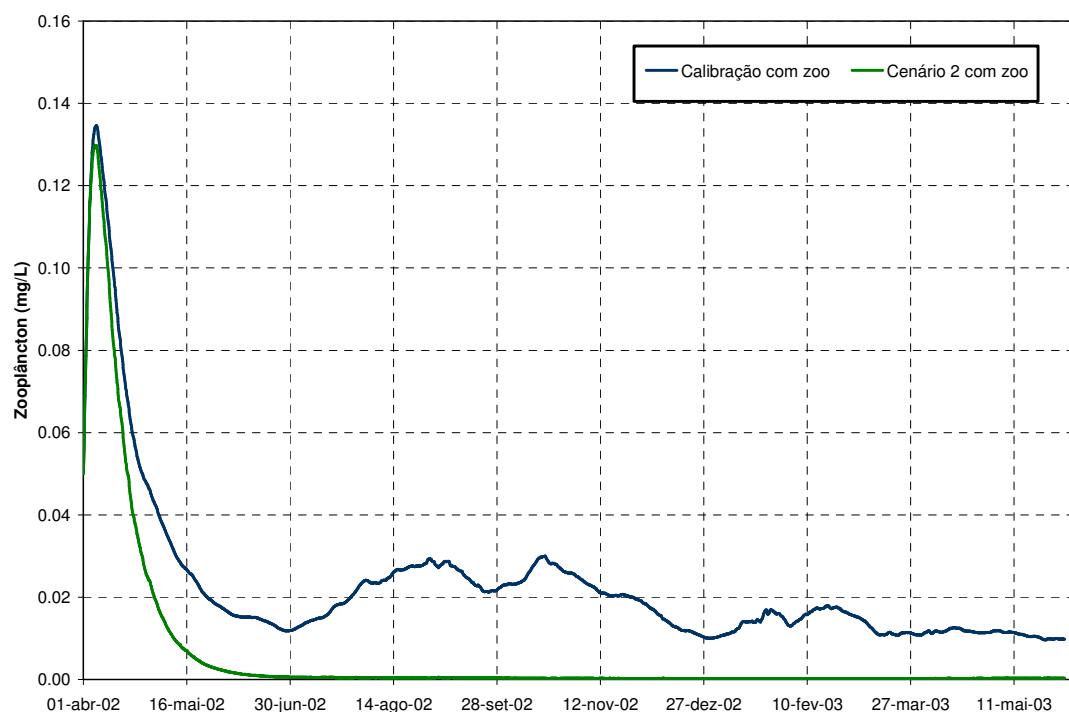


FIGURA 94 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE ZOOPLÂNCTON OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

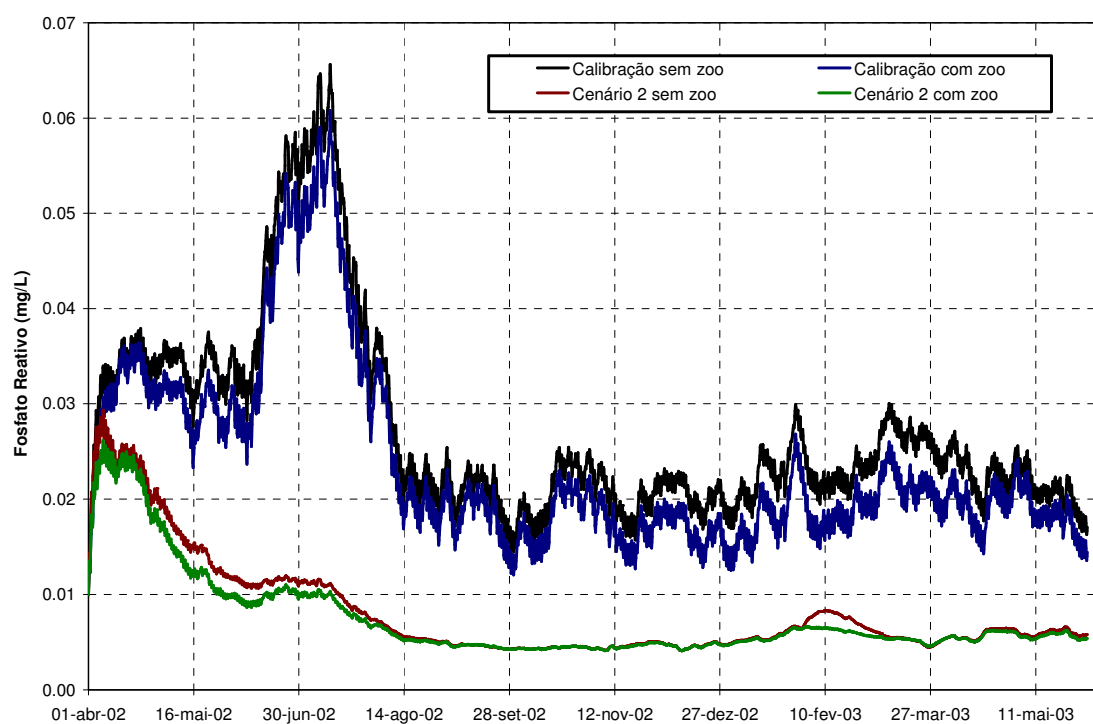


FIGURA 95 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO REATIVO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

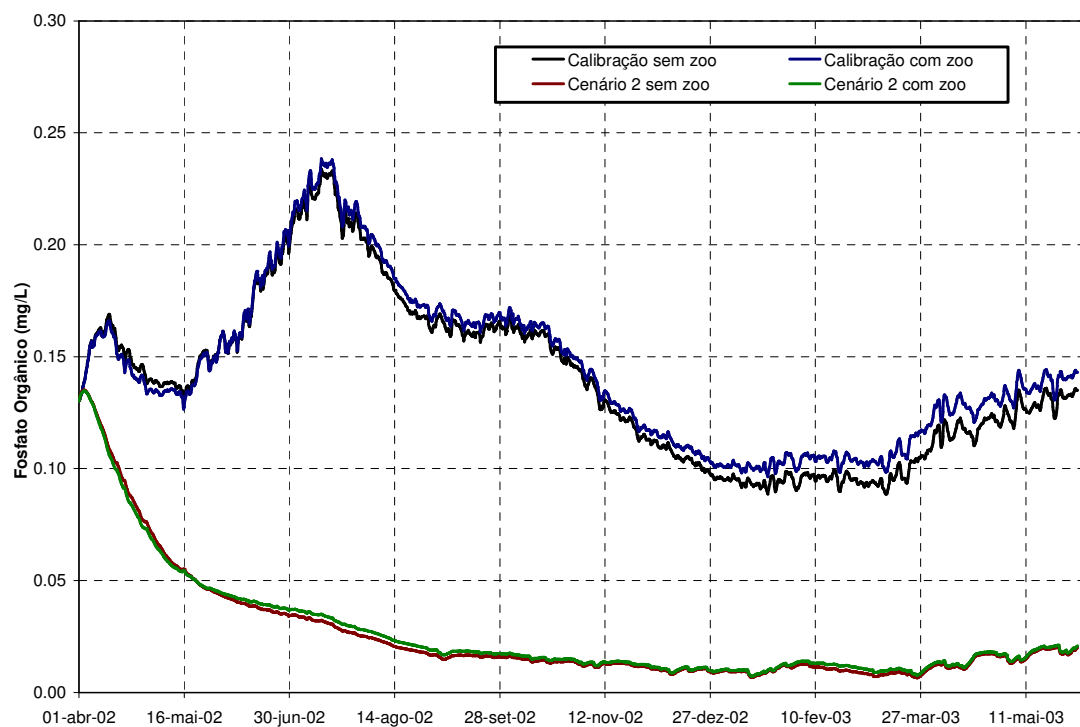


FIGURA 96 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE FOSFATO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

Na Figura 97, na Figura 98 e na Figura 99 são mostrados os resultados de nitrato, de amônia e de nitrogênio orgânico. No cenário 2 houve um menor consumo das formas inorgânicas de nitrogênio, resultando no aumento das suas concentrações. No caso do nitrogênio orgânico, a diminuição da concentração de clorofila *a* resultou na redução da sua concentração, devido à menor contribuição dos processos de excreção e morte.

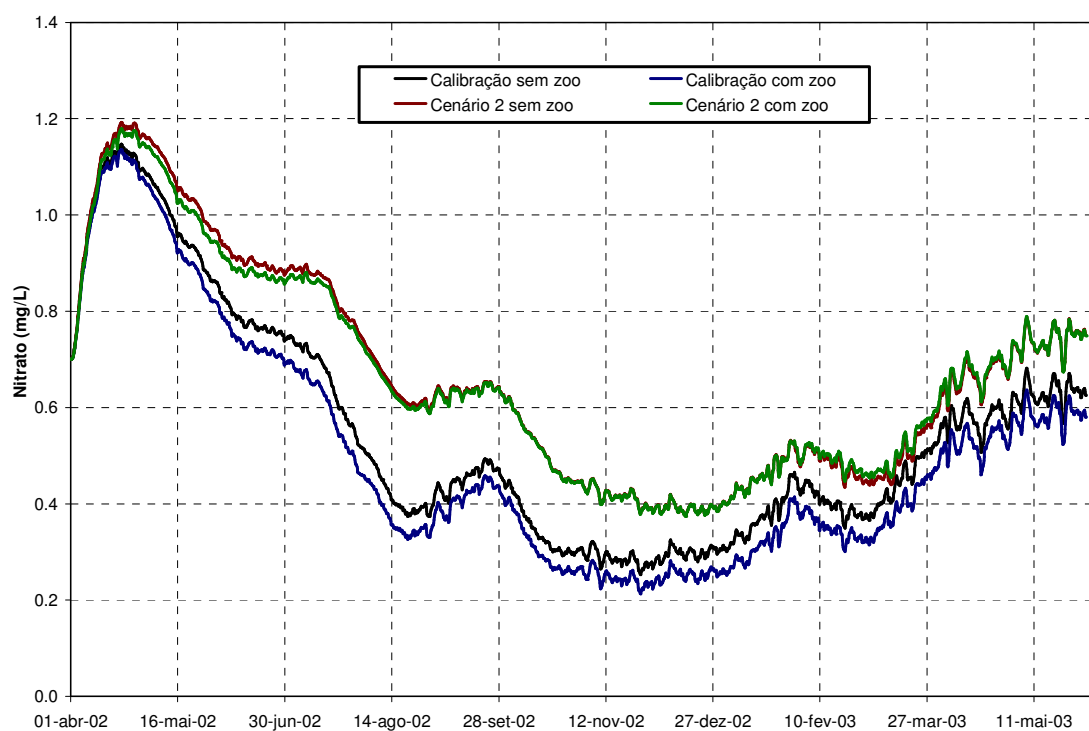


FIGURA 97 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITRATO OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

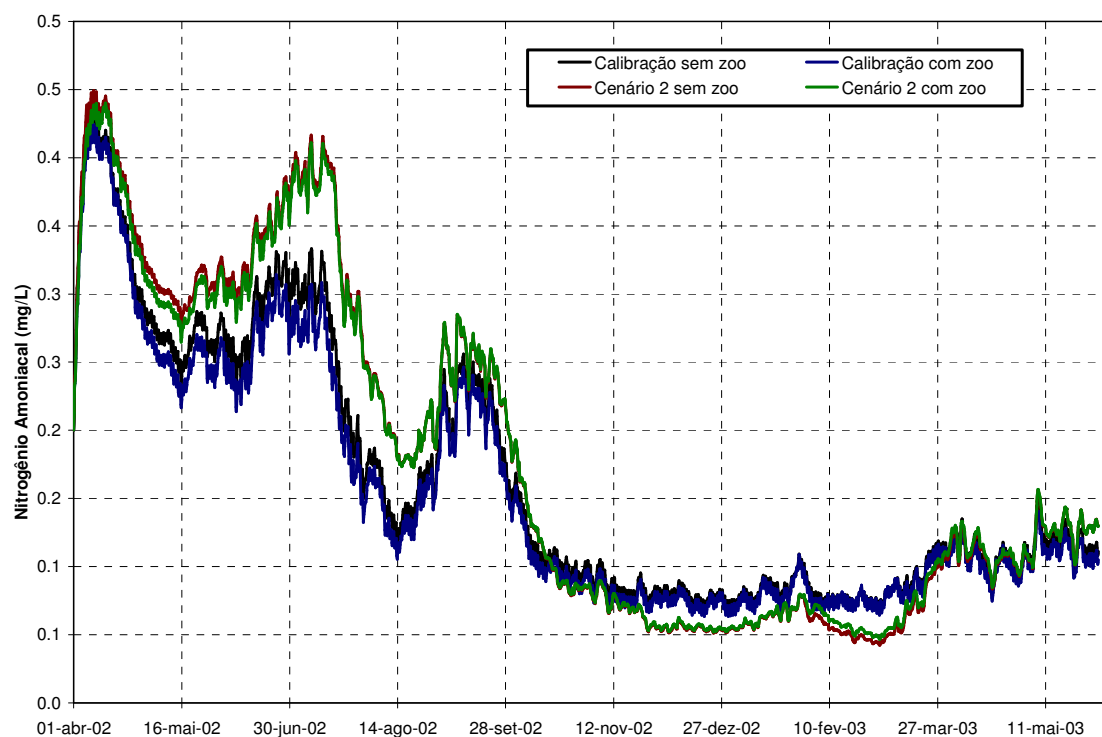


FIGURA 98 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE AMÔNIA OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

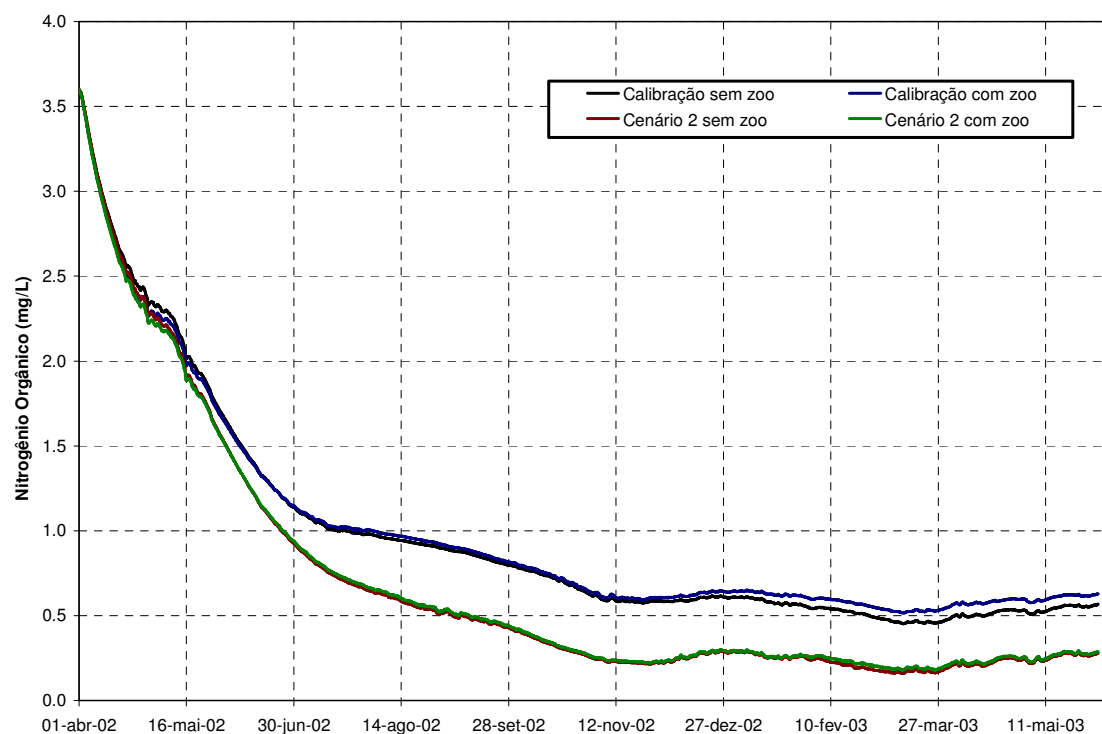


FIGURA 99 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE NITROGÊNIO ORGÂNICO OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

Na Figura 100 e na Figura 101 são mostrados os resultados de concentração de OD e de DBO. Com a menor produtividade encontrada no sistema, observada pelas baixas concentrações de clorofila *a*, houve uma diminuição na concentração da DBO, devido às menores contribuições causadas pelo processo de mortalidade e pelos detritos da herbivoria. No caso do OD, resultados similares foram encontrados em todas as simulações.

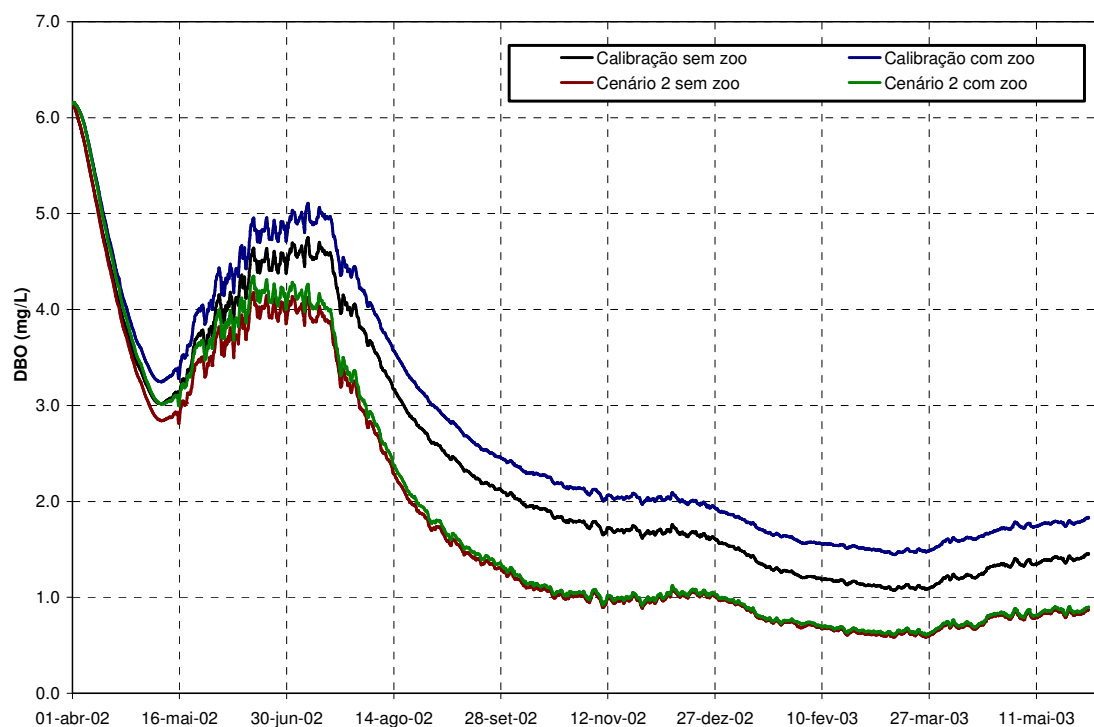


FIGURA 100 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE DBO OBTIDOS PELO SISBAHIA® CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

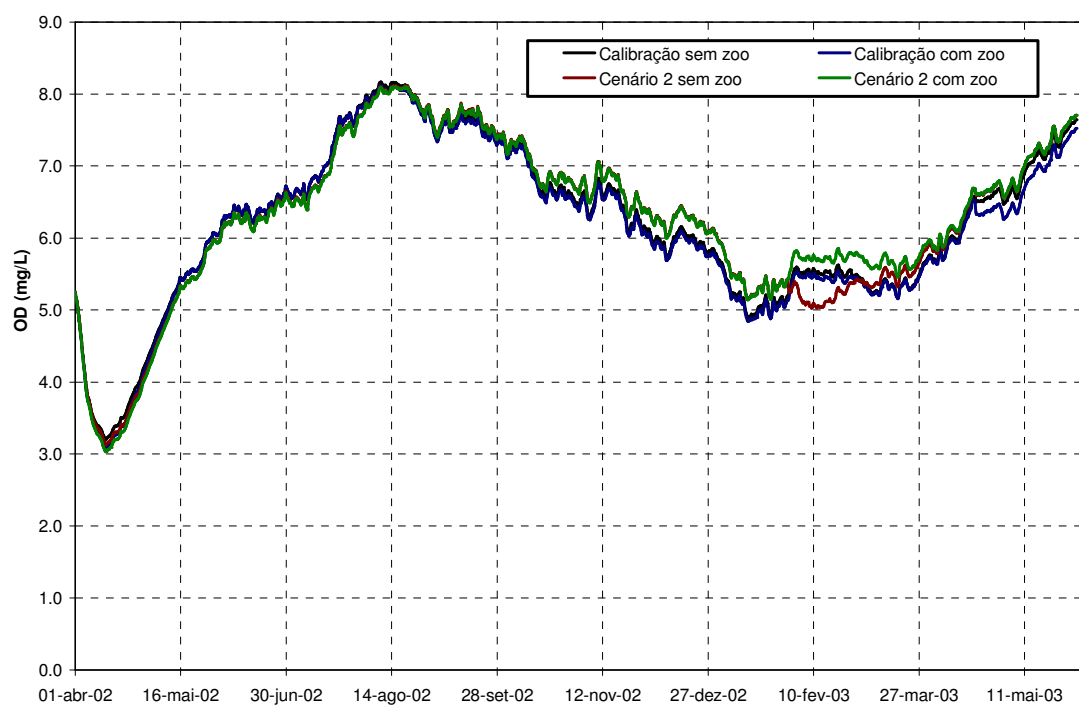


FIGURA 101 - VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE OD OBTIDOS PELO SISBAHIA[®] CONSIDERANDO O CENÁRIO 2

6 Conclusões

Neste trabalho foi apresentada uma aplicação do modelo de qualidade da água do SisBAHIA[®], com o objetivo de estudar o fenômeno da eutrofização e o crescimento excessivo de algas em reservatórios, servindo de base para novas aplicações e desenvolvimentos. Apesar dos erros associados às condições de contorno e das simplificações consideradas, o modelo demonstrou sua potencialidade em representar adequadamente um conjunto de dados obtidos em um reservatório eutrofizado.

A periodicidade de medição dos dados de qualidade da água, nos tributários do reservatório do Iraí, indica o erro que pode estar associado na definição das condições de contorno de concentração das variáveis consideradas no MQA. Além disso, o uso de vazões constantes no modelo hidrodinâmico, devido a pouca quantidade de dados, pode causar erros significativos na estimativa das cargas destas variáveis. A utilização de modelos hidrológicos pode auxiliar na definição de vazões a partir de dados de precipitação. Porém, estes modelos também necessitam de dados para serem calibrados. Alguns modelos hidrológicos são capazes de gerar cargas de nutrientes e de matéria orgânica, sendo, portanto, ferramentas de grande utilidade no processo de modelagem de corpos de água e podendo ser utilizados em novos estudos.

Como não foi possível calibrar e verificar os resultados do modelo hidrodinâmico, os erros associados aos processos de transporte das substâncias podem ser grandes. Além disso, a utilização de um modelo bidimensional na horizontal não leva em consideração o fenômeno da estratificação térmica no reservatório e o efeito das diferenças de densidade da água nas entradas dos tributários. Outra consideração importante é o fato de que os organismos fitoplanctônicos se distribuem principalmente na zona eufótica, estando sujeitos aos processos de transporte causados pelo campo de velocidades nesta região superficial. Assim, a tendência das algas de serem transportadas principalmente no sentido do vento não foi representada pelo modelo. Estes fatores dificultaram a calibração do modelo de qualidade da água simultaneamente em todos os pontos monitorados.

A partir dos resultados do modelo hidrodinâmico, foi possível verificar a grande influência do vento na determinação da circulação hidrodinâmica. Assim, foi demonstrada a importância da utilização correta de dados de vento em estudos de modelagem em reservatórios. Estes dados devem ser obtidos em estações meteorológicas localizadas o mais próximo possível do reservatório em estudo, e correções referentes à, por exemplo, elevação e efeitos da localização da estação, e à estabilidade devido à diferença de temperatura entre o ar e a água, devem ser consideradas.

A análise de sensibilidade realizada foi eficaz para avaliar o comportamento do MQA e determinar os parâmetros mais influentes para cada variável. Desta forma, informações importantes foram obtidas para auxiliar no processo de calibração. Apesar desta análise ter sido realizada com dados do reservatório do Iraí, os seus resultados poderão nortear futuras aplicações do modelo em outros corpos de água. Deve-se lembrar que o processo de calibração é demorado, devido ao elevado tempo gasto em cada simulação.

Os cenários simulados, com aumento e redução da carga de fósforo lançada no reservatório, mostraram resultados coerentes. A consideração da variável zooplâncton herbívoro no MQA mostrou sua grande influência nos resultados dos cenários para a variável clorofila *a*, substância indicadora da concentração de fitoplâncton. Entretanto, os resultados obtidos na simulação dos cenários são apenas ilustrativos, já que o MQA não foi validado para um novo conjunto de dados. Além disso, não havia dados de zooplâncton que pudessem ser utilizados para a verificação dos resultados. Assim, novos estudos devem ser realizados considerando a importância desta variável para a realização de cenários de importância na gestão da qualidade da água de reservatórios.

Os erros relativos médios calculados na calibração do MQA podem servir como comparação para novos estudos. Desta forma, pretende-se iniciar uma discussão em relação ao erro máximo admissível na calibração e validação do MQA do SisBAHIA[®] em aplicações visando à gestão de corpos de água. Apesar da inclusão da variável zooplâncton herbívoro, o MQA do SisBAHIA[®] é um modelo simples, que não considera os últimos progressos na modelagem ecológica e da qualidade da água. Desta maneira, novos estudos podem ser realizados de forma a desenvolver o modelo, considerando, por exemplo, diferentes grupos de fitoplâncton

e de zooplâncton, e a variação nas razões estequiométricas destes organismos. Entretanto, o aumento da complexidade faz com que uma maior quantidade de dados seja necessária para a calibração e a validação do modelo, dificultando a sua aplicação.

Apesar das diversas possibilidades de evolução, o fato do MQA do SisBAHIA[®] ser integrado na vertical restringe a sua aplicabilidade a corpos de água rasos que não se estratificam e não representa de forma realística o transporte dos organismos fitoplanctônicos, distribuídos principalmente na zona eufótica. Assim, novos estudos devem ser realizados para considerar a divisão da coluna de água em camadas de diferentes densidades, aumentando as possibilidades de aplicação do modelo e a qualidade dos seus resultados. Além disso, um novo compartimento pode ser criado para representar o sedimento do fundo, representando de forma adequada as interações entre a interface sedimento-água.

REFERÊNCIAS

ABBOT, M. B.; BASCO, D. R. **Computational Fluid Dynamics**. Nova York: John Wiley & Sons Inc., 1989.

ANDREOLI, C. V.; CARNEIRO, C (ed.). **Gestão Integrada de Mananciais de Abastecimento Eutrofizados**. Curitiba: SANEPAR/FINEP, 2005.

ARHONDITSIS, G. B.; BRETT, M. T. **Eutrophication model for Lake Washington (USA) Part I. Model description and sensitivity analysis**. Ecological Modeling 187, pg. 140-178, 2005.

BOWIE, G.L.; MILLS, W.B.; PORCELLA, D.B.; CAMPBELL, C.L.; PAGENKOPF, J.R.; RUPP, G.L.; JOHNSON, K.M.; CHAN, P.W.H.; GHERINI, S.A.; CHAMBERLIN, C.E. **Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling**. 2nd ed. Report n° EPA-600/3-85-040. USEPA, 1985.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. USA: McGraw-Hill Companies, 1997.

CUNHA, C. L. N.; MONTEIRO, T.; ROSMAN, P. C. C. **Modelagem Bidimensional de Transporte de Escalares Não-conservativos em Corpos D'água Rasos**. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, Brasil, vol. 7, no2, 2002.

CUNHA, C. L. N.; ROSMAN, P. C. C.; FERREIRA, A. P.; MONTEIRO, T. C. N. **Hydrodynamics and water quality models applied to Sepetiba Bay**. Continental Shelf Research, v. 26, p. 1940-1953, 2006.

ESTEVES, F. A. **Fundamentos de Limnologia**. Rio de Janeiro: INTERCIENCIA/FINEP, 1998.

FERNANDES, L. F.; LAGOS, P. D.; WOSIACK, A. C.; PACHECO, C. V.; DOMINGUES, L.; ALVES, L. Z.; COQUEMALA, V. Comunidades Fitoplanctônicas em Ambientes Lênticos. In: ANDREOLI, C. V.; CARNEIRO, C. **Gestão Integrada de Mananciais de Abastecimento Eutrofizados**. Curitiba: SANEPAR/FINEP, 2005.

FORD, D.E. Reservoir transport processes. In: Thornton, K.W.; Kimmel, B.L.; Payne, F.E. (ed.). **Reservoir limnology: ecological perspectives**. New York: John Wiley & Sons, 1990. p.15-41.

FISCHER, H. B. **Mixing in Inland and Coastal Waters**. New York: Academic Press Inc., 1979

FRAGOSO JR, C. R.; MARQUES, D. M.; FERREIRA, T. F. **Modelagem ecológica em ecossistemas aquáticos**. São Paulo: Oficina de Textos, 2009.

GEORGE, D. G.; HEAVEY, S.I. **Factors influencing the spatial distribution of phytoplankton in a small productive lake**. J. Ecol., vol. 66, no. 1, p. 133-155, 1978.

HUTCHINSON, G. E. **A treatise on limnology**. v. 1. New York: John Wiley & Sons, 1957.

IAP - INSTITUTO AMBIENTAL DO PARANÁ. **Monitoramento da qualidade das águas dos reservatórios do estado do Paraná, no período de 1999 a 2004**. Curitiba, 2004.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). **Estimativas / Contagem da População 2007**. Disponível em <www.ibge.gov.br>. Acesso em : 30/05/09.

JUNIOR, M. S.; GHIDINI, A. R.; NEVES, G. P.; BRITO, L. Comunidade Zooplancônica. In: ANDREOLI, C. V.; CARNEIRO, C. **Gestão Integrada de Mananciais de Abastecimento Eutrofizados**. Curitiba: SANEPAR/FINEP, 2005.

LAMPARELLI, M.C. **Graus de trofia em corpos d'água do estado de São Paulo: avaliação dos métodos de monitoramento**. 207 p. Tese. Universidade de São Paulo, Instituto de Biociência, São Paulo, 2004.

MANACHE, G.; MELCHING, C. S. **Identification of reliable regression- and correlation-based sensitivity measures for importance ranking of water-quality model parameters**. Environmental Modelling & Software, v.23 n.5, p.549-562, 2008.

MATEUS, M. D. **A process-oriented biogeochemical model for marine ecosystems: Development, numerical study, and application**. 246 p. PhD. Instituto Superior Técnico, Lisboa, 2006.

NOGUEIRA, V. P. Q. Qualidade da água em lagos e reservatórios. In: PORTO, R.L.L. **Hidrologia Ambiental**. São Paulo: Editora do Estado de São Paulo, 1991. p.165-210.

ODUM, EP. **Ecologia**. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1983.

RECKHOW, K.H.; CHAPRA, S.C. **Confirmation of water quality models**. Ecol. Modeling, 20:113-133, 1983.

ROSMAN, P. C. C. Subsídios para Modelagem de Sistemas Estuarinos. In: Rui Vieira. (Org.). **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos**. v. 3. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 1997.

ROSMAN, P. C. C. Um Sistema Computacional de Hidrodinâmica Ambiental. In: SILVA, R., C., V. **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos**. v. 5. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 2001.

ROSMAN, P.C.C. **Referência Técnica do SISBAHIA® – Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental**. Disponível em: <http://www.sisbahia.coppe.ufrj.br/>. Acesso em: 10/03/09.

SALAS, H.J.; MARTINO, P. **Metodologias simplificadas para evaluación de eutroficação em lagos cálidos tropicales**. Relatório CEPIS, 2001.

SALAS, H. J.; MARTINO, P. **A simplified phosphorus trophic state model for warm-water tropical lakes**. Water Research, 25 (3).p. 341-350, 1991.

SAWYER, C. N.; MCCARTY, P. L.; PARKIN, G. F. **Chemistry for Environmental Engineering and Science**. 5th ed. USA: McGraw-Hill Companies, 2003.

SCHLADOW, G.; HAMILTON, D. **Prediction of water quality in lakes and reservoirs; Part 1 – Model description**. Ecol. Model. 96, 91–110, 1997.

TELESH, I. V.; RAHKOLA, M.; VILJANEN, M. **Carbon content of some freshwater rotifers**. Hydrobiologia 387/388: 355–360. 1998.

THOMANN, R. V.; MUELLER, J.A. **Principles of surface water quality modeling and control**. USA: Harper Collins Publishers, 1987.

THORNTON, K. W.; KIMMEL, B. L.; PAYNE, F. E. **Reservoir Limnology: Ecological Perspectives**. New York: Wiley-Interscience Publication, 1990.

TUNDISI, J.G. Reservatórios como Sistemas Complexos: Teoria, Aplicações e Perspectivas para Usos Múltiplos. In: HENRY, R. **Ecologia de Reservatórios: Estrutura, Função e Aspectos Sociais**. Botucatu: FAPESP, 1999.

VON SPERLING, M. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. Belo Horizonte: Editora do Depto de Eng. Sanitária UFMG, 1995.

WATER QUALITY RESEARCH GROUP. Disponível em
<<http://www.ce.pdx.edu/w2/>>. Acesso em: 15/07/09.

WETZEL, R. G. **Limologia**. Barcelona: Eiciones Omega, 1981.

WOOL, T.A.; AMBROSE, R.B.; NARTIN, J.L.; COMER, E.A. **Water Quality Analysis Simulation Program (WASP)**: Version 6.0 User's Manual. USEPA, 2002.

ZHAO, J.; RAMIN, M.; CHENG, V.; ARHONDITSIS. **Competition patterns among phytoplankton functional groups: How useful are the complex mathematical models?** Acta Oecologica, 2008.

APÊNDICE

SÍMBOLO	PARÂMETRO	FAIXA	VALOR COMUM	UNIDADES	REFERÊNCIA
$k_g(20)$	Taxa de crescimento do fitoplâncton a 20°C	0.2-8.0	2	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
θ_g	Fator de correção da temperatura para o crescimento de fitoplâncton	1.01-1.2	1.066	-	Bowie et al. (1985)
k_{sN}	Constante de meia saturação de N	1.4 – 400.0	25.0-200.0	$\mu gN L^{-1}$	Bowie et al. (1985)
k_{sP}	Constante de meia saturação de P	0.5 – 80.0	20.0-50.0	$\mu gP L^{-1}$	Bowie et al. (1985)
I_s	Nível ótimo de luz	100-170	120-145	$W m^{-2}$	Bowie et al. (1985)
k_{sa}	Constante de meia saturação para herbivoria	2 – 25	5 – 15	$(\mu gChla L^{-1})$	Chapra (1997)
θ_{gz}	Fator de correção da temperatura para herbivoria		1.08	-	Chapra (1997)
$k_{gz}(20)$	Taxa de herbivoria a 20°C	0.5 – 5.0	1.0 – 2.0	$m^3 gC^{-1} d^{-1}$	Chapra (1997)
$k_{ra}(20)$	Perdas de fitoplâncton por respiração e excreção a 20 °C	0.005 – 0.8	0.05 – 0.2	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
θ_{ra}	Fator de correção da temperatura para perdas de fitoplâncton por respiração e excreção		1.08	-	Chapra (1997)
$k_{rz}(20)$	Perdas do zooplâncton por respiração e excreção a 20 °C	0.001 – 0.36	0.01 – 0.05	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
θ_{rz}	Fator de correção da temperatura para perdas do zooplâncton por respiração e excreção		1.08	-	Chapra (1997)
E_z	Eficiência de herbivoria	0.4 – 0.8	0.6	-	Chapra (1997)
θ_{gzc}	Fator de correção da temperatura para perdas do zooplâncton por predação		1.08	-	Chapra (1997)
$k_{gzc}(20)$	Perdas do zooplâncton por predação	0.001 – 0.1	0.01-0.05	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
f_{on}	Fração de morte e respiração do fitoplâncton reciclada para nitrogênio orgânico		0.5	-	Wool et al. (2002)
k_{am}	Constante de meia saturação para preferência de amônia		50	$\mu gN L^{-1}$	Chapra (1997)
r_{oc}	Quantidade de oxigênio consumido na decomposição de um grama de carbono orgânico		2.67	$gO.gC^{-1}$	Chapra (1997)
r_{ca}	Razão carbono/clorofila nas células das algas	10-100	50	$gC gChla^{-1}$	Bowie et al. (1985)
θ_{12}	Coeficiente de temperatura para a nitrificação	1.02-1.08	1.08	-	Bowie et al. (1985)
θ_{2D}	Coeficiente de temperatura para desnitrificação	1.02-1.09	1.045	-	Bowie et al. (1985)
θ_{71}	Coeficiente de temperatura para a amonificação	1.02-1.09	1.08	-	Bowie et al. (1985)

SÍMBOLO	PARÂMETRO	FAIXA	VALOR COMUM	UNIDADES	REFERÊNCIA
θ_{83}	Coeficiente de temperatura para a mineralização do fósforo orgânico	1.02-1.09	1.08	-	Bowie et al. (1985)
θ_a	Coeficiente de temperatura para a reaeração	1.008-1.047	1.024	-	Bowie et al. (1985)
θ_D	Coeficiente de temperatura para a desoxigenação	1.02-1.15	1.047	-	Bowie et al. (1985)
θ_s	Coeficiente de temperatura para a demanda de oxigênio no sedimento		1.08	-	Wool et al. (2002)
f_{D5}	Fração de DBO dissolvido na coluna de água	0.1-0.9	0.5	-	Wool et al. (2002)
f_{D7}	Fração de nitrogênio orgânico dissolvido na coluna de água	0.1-1.0	1	-	Wool et al. (2002)
f_{D8}	Fração de fósforo orgânico dissolvido na coluna de água.	0.1-1.0	0.85	-	Wool et al. (2002)
f_{op}	Fração de morte e respiração da fitoplâncton reciclada para fósforo orgânico	0.1-0.9	0.5	-	Wool et al. (2002)
$k_{12}(20)$	Coeficiente de nitrificação em 20 °C	0.03-0.9	0.1-0.5	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
$k_{2D}(20)$	Coeficiente de desnitrificação em 20 °C	0-1.0	0.1	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
$k_{71}(20)$	Coeficiente de amonificação em 20 °C	0.001-0.2	0.03	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
$k_{83}(20)$	Coeficiente de mineralização do fósforo orgânico em 20 °C	0.001-0.8	0.03	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
$k_a(20)$	Coeficiente de reaeração em 20 °C	0.1-5.0	1.38	d^{-1}	Wool et al. (2002)
$k_D(20)$	Coeficiente de desoxigenação em 20 °C	0.01-1.5	0.2	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
k_{DBO}	Constante de meia saturação para oxidação da DBO		0.5	$mgO_2 L^{-1}$	Bowie et al. (1985)
k_{NIT}	Constante de meia saturação da nitrificação por limitação de oxigênio	0.5-2.0	0.5	$mgO_2 L^{-1}$	Bowie et al. (1985)
k_{ea}	Taxa de mortalidade do fitoplâncton	0.003-0.17	0.01-0.1	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
k_{ez}	Taxa de mortalidade do zooplâncton	0.001-0.125	0.005-0.02	d^{-1}	Bowie et al. (1985)
$SOD(20)$	Demanda de oxigênio no sedimento em 20 °C	0.2-4.0	1	$gO_2 m^{-2} d^{-1}$	Wool et al. (2002)
v_{s3}	Velocidade de deposição de substância orgânica	0.2-2.3	1	$m d^{-1}$	Chapra (1997)
v_{s4}	Velocidade de sedimentação da biomassa	0-30.0	0.05-2.0	$m d^{-1}$	Bowie et al. (1985)
v_{fr}	Velocidade de precipitação do fósforo inorgânico	-	-	$m d^{-1}$	
r_{na}	razão nitrogênio clorofila	2.7-29.0	9.0	$mgN mgChla^{-1}$	Bowie et al. (1985)
r_{pa}	razão fósforo clorofila	0.5-1.0	1.0	$mgP mgChla^{-1}$	Bowie et al. (1985)

QUADRO 16 - VALORES DOS PARÂMETROS UTILIZADOS NO MQA